

FDPS Fortran インタフェース ユーザチュートリアル

行方大輔, 岩澤全規, 似鳥啓吾, 谷川衝, 村主崇行, Long Wang, 細野七月, 野
村昂太郎, and 牧野淳一郎

理化学研究所 計算科学研究センター 粒子系シミュレータ研究チーム

0 目次

1 变更記録	6
2 概要	7
3 入門：サンプルコードを動かしてみよう	8
3.1 動作環境	8
3.2 必要なソフトウェア	8
3.2.1 標準機能	8
3.2.1.1 逐次処理	8
3.2.1.2 並列処理	8
3.2.1.2.1 OpenMP	9
3.2.1.2.2 MPI	9
3.2.1.2.3 MPI+OpenMP	9
3.2.2 拡張機能	9
3.2.2.1 Particle Mesh	10
3.3 インストール	10
3.3.1 取得方法	10
3.3.1.1 最新バージョン	10
3.3.1.2 過去のバージョン	11
3.3.2 インストール方法	11
3.4 サンプルコードの使用方法	11
3.4.1 重力 N 体シミュレーションコード	11
3.4.1.1 概要	11
3.4.1.2 ディレクトリ移動	12
3.4.1.3 Makefile の編集	12

3.4.1.4	make の実行	14
3.4.1.5	実行	15
3.4.1.6	結果の解析	15
3.4.1.7	x86 版 Phantom-GRAPE を使う場合	17
3.4.1.8	PIKG を使う場合	17
3.4.2	SPH シミュレーションコード	18
3.4.2.1	概要	18
3.4.2.2	ディレクトリ移動	18
3.4.2.3	Makefile の編集	18
3.4.2.4	make の実行	18
3.4.2.5	実行	18
3.4.2.6	結果の解析	19
4	サンプルコードの解説	21
4.1	N 体シミュレーションコード	21
4.1.1	ソースファイルの場所と構成	21
4.1.2	ユーザー定義型・ユーザ定義関数	21
4.1.2.1	FullParticle 型	21
4.1.2.2	相互作用関数 calcForceEpEp	23
4.1.2.3	相互作用関数 calcForceEpSp	24
4.1.3	プログラム本体	25
4.1.3.1	fdps_controller 型オブジェクトの生成	25
4.1.3.2	開始、終了	26
4.1.3.3	オブジェクトの生成・初期化	26
4.1.3.3.1	オブジェクトの生成	26
4.1.3.3.2	領域情報オブジェクトの初期化	27
4.1.3.3.3	粒子群オブジェクトの初期化	27
4.1.3.3.4	ツリーオブジェクトの初期化	27
4.1.3.4	粒子データの初期化	28
4.1.3.5	ループ	29
4.1.3.5.1	領域分割の実行	29
4.1.3.5.2	粒子交換の実行	29
4.1.3.5.3	相互作用計算の実行	29
4.1.3.5.4	時間積分	30
4.1.3.6	粒子データの更新	31
4.1.4	ログファイル	31
4.2	固定長 SPH シミュレーションコード	32
4.2.1	ソースファイルの場所と構成	32
4.2.2	ユーザー定義型・ユーザ定義関数	32
4.2.2.1	FullParticle 型	32
4.2.2.2	EssentialParticleI 型	33

4.2.2.3 Force型	34
4.2.2.4 相互作用関数 calcForceEpEp	35
4.2.3 プログラム本体	37
4.2.3.1 fdps_controller型オブジェクトの生成	38
4.2.3.2 開始、終了	38
4.2.3.3 オブジェクトの生成・初期化	38
4.2.3.3.1 オブジェクトの生成	39
4.2.3.3.2 領域情報オブジェクトの初期化	39
4.2.3.3.3 粒子群オブジェクトの初期化	40
4.2.3.3.4 ツリーオブジェクトの初期化	40
4.2.3.4 ループ	40
4.2.3.4.1 領域分割の実行	40
4.2.3.4.2 粒子交換の実行	40
4.2.3.4.3 相互作用計算の実行	41
4.2.4 コンパイル	41
4.2.5 実行	41
4.2.6 ログファイル	42
4.2.7 可視化	42
5 サンプルコード	43
5.1 N体シミュレーション	43
5.2 固定長SPHシミュレーション	56
6 拡張機能の解説	74
6.1 P ³ Mコード	74
6.1.1 サンプルコードの場所と作業ディレクトリ	74
6.1.2 ユーザー定義型	74
6.1.2.1 FullParticle型	74
6.1.2.2 EssentialParticleI型	75
6.1.2.3 Force型	76
6.1.2.4 相互作用関数 calcForceEpEp	77
6.1.2.5 相互作用関数 calcForceEpSp	78
6.1.3 プログラム本体	79
6.1.3.1 fdps_controller型オブジェクトの生成	80
6.1.3.2 開始、終了	80
6.1.3.3 オブジェクトの生成と初期化	81
6.1.3.3.1 オブジェクトの生成	81
6.1.3.3.2 オブジェクトの初期化	81
6.1.3.4 粒子分布の生成	82
6.1.3.4.1 領域分割の実行	83
6.1.3.4.2 粒子交換の実行	83

6.1.3.5	相互作用計算の実行	83
6.1.3.6	エネルギー相対誤差の計算	84
6.1.4	コンパイル	84
6.1.5	実行	84
6.1.6	結果の確認	85
7	より実用的なアプリケーションの解説	86
7.1	N体/SPHコード	86
7.1.1	コードの使用方法	86
7.1.1.1	ディレクトリ移動	87
7.1.1.2	サンプルコードのファイル構成	87
7.1.1.3	Makefile の編集	88
7.1.1.4	MAGI を使った粒子データの生成	90
7.1.1.5	make の実行	91
7.1.1.6	実行	91
7.1.1.7	結果の解析	91
7.1.2	Springel の方法	92
7.1.3	ユーザー定義型	94
7.1.3.1	FullParticle 型	94
7.1.3.2	EssentialParticle 型	95
7.1.3.3	Force 型	96
7.1.4	相互作用関数	97
7.1.4.1	重力計算	97
7.1.4.2	密度計算	101
7.1.4.3	圧力勾配加速度計算	105
7.1.5	プログラム本体	107
7.1.5.1	fdps_controller 型オブジェクトの生成	108
7.1.5.2	開始、終了	109
7.1.5.3	オブジェクトの生成と初期化	109
7.1.5.3.1	粒子群オブジェクトの生成と初期化	109
7.1.5.3.2	領域情報オブジェクトの生成と初期化	109
7.1.5.3.3	ツリーオブジェクトの生成と初期化	110
7.1.5.4	初期条件の設定	110
7.1.5.5	領域分割の実行	111
7.1.5.6	粒子交換の実行	111
7.1.5.7	相互作用計算の実行	112
7.1.5.8	時間積分ループ	114
8	ユーザーサポート	115
8.1	コンパイルできない場合	115
8.2	コードがうまく動かない場合	115

8.3 その他	115
9 ライセンス	116

1 変更記録

- 2016/12/22
 - 作成および初期リリース (FDPS バージョン 3.0 として)
- 2018/07/11
 - 第 4 節の以下の記述の修正・改善
 - * ユーザ定義型のソースコードの一部が端切れしていた (第 4.1 節, 第 4.2 節)
 - * 一部のディレクトリ名に誤植
- 2018/08/29
 - N 体/SPH サンプルコードの解説を追加 (第 7.1 節)
- 2018/08/31
 - x86 用 Phantom-GRAPE ライブライアリの節を追加 (第 3.4.1.7 節)
- 2019/07/19
 - N 体/SPH サンプルコードの記述を改訂 (第 7.1 節)
- 2020/08/16
 - PIKG の利用法を追加 (第 3.4.1.8 節)
- 2020/08/28
 - N 体/SPH コード (第 7.1 節) で使用可能な初期条件ファイルの配布先情報を変更
- 2020/09/02
 - ツリーオブジェクトを初期化する API init_tree の第一引数の説明に誤解を招く表現があったため修正。サンプルコードも合わせて修正。

2 概要

本節では、Framework for Developing Particle Simulator (FDPS) および FDPS Fortran インターフェース の概要について述べる。FDPS は粒子シミュレーションのコード開発を支援するフレームワークである。FDPS が行うのは、計算コストの最も大きな粒子間相互作用の計算と、粒子間相互作用の計算のコストを負荷分散するための処理である。これらはマルチプロセス、マルチスレッドで並列に処理することができる。比較的計算コストが小さく、並列処理を必要としない処理(粒子の軌道計算など)はユーザーが行う。

FDPS が対応している座標系は、2 次元直交座標系と 3 次元直交座標系である。また、境界条件としては、開放境界条件と周期境界条件に対応している。周期境界条件の場合、 x 、 y 、 z 軸方向の任意の組み合わせの周期境界条件を課すことができる。

ユーザーは粒子間相互作用の形を定義する必要がある。定義できる粒子間相互作用の形には様々なものがある。粒子間相互作用の形を大きく分けると 2 種類あり、1 つは長距離力、もう 1 つは短距離力である。この 2 つの力は、遠くの複数の粒子からの作用を 1 つの超粒子からの作用にまとめるか(長距離力)、まとめないか(短距離力)という基準でもって分類される。

長距離力には、小分類があり、無限遠に存在する粒子からの力も計算するカットオフなし長距離力と、ある距離以上離れた粒子からの力は計算しないカットオフあり長距離力がある。前者は開境界条件下における重力やクーロン力に対して、後者は周期境界条件下の重力やクーロン力に使うことができる。後者のためには Particle Mesh 法などが必要となるが、これは FDPS の拡張機能として用意されている。

短距離力には、小分類が 4 つ存在する。短距離力の場合、粒子はある距離より離れた粒子からの作用は受けない。すなわち必ずカットオフが存在する。このカットオフ長の決め方によって、小分類がなされる。すなわち、全粒子のカットオフ長が等しいコンスタントカーネル、カットオフ長が作用を受ける粒子固有の性質で決まるギャザーカーネル、カットオフ長が作用を与える粒子固有の性質で決まるスキヤッタカーネル、カットオフ長が作用を受ける粒子と作用を与える粒子の両方の性質で決まるシンメトリックカーネルである。コンスタントカーネルは分子動力学における LJ 力に適用でき、その他のカーネルは SPH などに適用できる。

ユーザーは、粒子間相互作用や粒子の軌道積分などを、Fortran 2003 を用いて記述する。

3 入門：サンプルコードを動かしてみよう

本節では、まずははじめに、FDPS および FDPS Fortran インターフェース の動作環境、必要なソフトウェア、インストール方法などを説明し、その後、サンプルコードの使用方法を説明する。サンプルコードの中身に関しては、次節(第4節)で詳しく述べる。

3.1 動作環境

FDPS は Linux, Mac OS X, Windows などの OS 上で動作する。

3.2 必要なソフトウェア

本節では、FDPS を使用する際に必要となるソフトウェアを記述する。まず標準機能を用いるのに必要なソフトウェア、次に拡張機能を用いるのに必要なソフトウェアを記述する。

3.2.1 標準機能

本節では、FDPS の標準機能のみを使用する際に必要なソフトウェアを記述する。最初に逐次処理機能のみを用いる場合(並列処理機能を用いない場合)に必要なソフトウェアを記述する。次に並列処理機能を用いる場合に必要なソフトウェアを記述する。

3.2.1.1 逐次処理

逐次処理の場合に必要なソフトウェアは以下の通りである。

- make
- C++コンパイラ (gcc バージョン 8 以降なら確実)
- Ruby (PIKG に必要。3.0.2 で動作確認済)
- Fortran コンパイラ (Fortran 2003 標準をサポートし、上記 C++コンパイラと相互運用可能なものの。gcc 8 以降の gfortran なら確実)
- Python 2.7.5 以上、または、Python 3.4 以上(これ以外での正常動作は保証しない。特に、Python 2.7 以前では動作しない)

3.2.1.2 並列処理

本節では、FDPS の並列処理機能を用いる際に必要なソフトウェアを記述する。まず、OpenMP を使用する際に必要なソフトウェア、次に MPI を使用する際に必要なソフトウェア、最後に OpenMP と MPI を同時に使用する際に必要なソフトウェアを記述する。

3.2.1.2.1 OpenMP

OpenMP を使用する際に必要なソフトウェアは以下の通り。

- make
- OpenMP 対応の C++ コンパイラ (gcc version 8 以降なら確実)
- OpenMP 対応の Fortran コンパイラ (Fortran 2003 標準をサポートし、上記 C++ コンパイラと相互運用可能なものの。gcc 8 以降なら確実)
- Python 2.7.5 以上、または、Python 3.4 以上 (これ以外での正常動作は保証しない。特に、Python 2.7 以前では動作しない)

3.2.1.2.2 MPI

MPI を使用する際に必要なソフトウェアは以下の通り。

- make
- MPI version 1.3 対応の C++ コンパイラ (Open MPI 1.6.4 で動作確認済)
- MPI version 1.3 対応の Fortran コンパイラ (Fortran 2003 標準をサポートし、上記 C++ コンパイラと相互運用可能なものの。Open MPI 1.6.4 で動作確認済み)
- Python 2.7.5 以上、または、Python 3.4 以上 (これ以外での正常動作は保証しない。特に、Python 2.7 以前では動作しない)

3.2.1.2.3 MPI+OpenMP

MPI と OpenMP を同時に使用する際に必要なソフトウェアは以下の通り。

- make
- MPI version 1.3 と OpenMP に対応の C++ コンパイラ (Open MPI 1.6.4 で動作確認済、K コンパイラバージョン 1.2.0 で動作確認済)
- MPI version 1.3 と OpenMP に対応の Fortran コンパイラ (Fortran 2003 標準をサポートし、上記 C++ コンパイラと相互運用可能なものの。Open MPI 1.6.4 で動作確認済み)
- Python 2.7.5 以上、または、Python 3.4 以上 (これ以外での正常動作は保証しない。特に、Python 2.7 以前では動作しない)

3.2.2 拡張機能

本節では、FDPS の拡張機能を使用する際に必要なソフトウェアについて述べる。FDPS の拡張機能には Particle Mesh がある。以下では Particle Mesh を使用する際に必要なソフトウェアを述べる。

3.2.2.1 Particle Mesh

Particle Mesh を使用する際に必要なソフトウェアは以下の通りである。

- make
- MPI version 1.3 と OpenMP に対応の C++コンパイラ (Open MPI 1.6.4 で動作確認済)
- FFTW 3.3 以降

3.3 インストール

本節では、FDPS および FDPS Fortran インターフェース のインストールについて述べる。取得方法、ビルド方法について述べる。

3.3.1 取得方法

ここでは FDPS の取得方法を述べる。最初に最新バージョンの取得方法、次に過去のバージョンの取得方法を述べる。

3.3.1.1 最新バージョン

以下の方法のいずれかで FDPS の最新バージョンを取得できる。

- ブラウザから
 1. ウェブサイト <https://github.com/FDPS/FDPS> で”Download ZIP”をクリックし、ファイル FDPS-master.zip をダウンロード
 2. FDPS を展開したいディレクトリに移動し、圧縮ファイルを展開
- コマンドラインから
 - Subversion を用いる場合：以下のコマンドを実行するとディレクトリ trunk の下を Subversion レポジトリとして使用できる

```
$ svn co --depth empty https://github.com/FDPS/FDPS
$ cd FDPS
$ svn up trunk
```

- Git を用いる場合：以下のコマンドを実行するとカレントディレクトリにディレクトリ FDPS ができ、その下を Git のレポジトリとして使用できる

```
$ git clone git://github.com/FDPS/FDPS.git
```

3.3.1.2 過去のバージョン

以下の方法でブラウザから FDPS の過去のバージョンを取得できる。

- ウェブサイト <https://github.com/FDPS/FDPS/releases> に過去のバージョンが並んでいるので、ほしいバージョンをクリックし、ダウンロード
- FDPS を展開したいディレクトリに移動し、圧縮ファイルを展開

3.3.2 インストール方法

C++言語で記述された FDPS 本体はヘッダライブラリ^{注 1)}のため、configure などを行う必要はない。基本的にはアーカイブを展開したあと、自分のソースファイルをコンパイルする時に適切なインクルードパスを設定すればよい。実際の手続きは第 3.4 節で説明するサンプルコードとその Makefile をみて欲しい。

Fortran の場合、コンパイル前に Fortran ソースファイルから FDPS とのインターフェースコードを生成する必要がある。その手順は仕様書 [doc/spec_ftn_ja.pdf](#) の第 6 章に記述されている。本サンプルコードの Makefile では、インターフェースコードが make コマンド実行中に自動的に生成されるようになっている。ユーザが自分のコードの Makefile を作る時にはサンプルコードの Makefile を参考にすることを推奨する。

3.4 サンプルコードの使用方法

本節ではサンプルコードの使用方法について説明する。サンプルコードには重力 N 体シミュレーションコードと、SPH シミュレーションコードがある。最初に重力 N 体シミュレーションコード、次に SPH シミュレーションコードの使用について記述する。サンプルコードは拡張機能を使用していない。

3.4.1 重力 N 体シミュレーションコード

本サンプルコードは、FDPS Fortran インターフェースを用いて書かれた無衝突系の N 体計算コードである。このコードでは一様球のコールドコラプス問題を計算し、粒子分布のスナップショットを出力する。

3.4.1.1 概要

以下の手順で本コードを使用できる。

- ディレクトリ \$(FDPS)/sample/fortran/nbody に移動。これ以後、ディレクトリ \$(FDPS) は FDPS の最も上の階層のディレクトリを指す \$(FDPS) は環境変数にはなっていない)。 \$(FDPS) は FDPS の取得によって異なり、ブラウザからなら FDPS-master, Subversion からなら trunk, Git からなら FDPS である。

^{注 1)} ヘッダファイルだけで構成されるライブラリのこと

- カレントディレクトリにある `Makefile` を編集
- コマンドライン上で `make` を実行
- `nbody.out` ファイルの実行
- 結果の解析

最後に x86 版 Phantom-GRAPE および PIKG を使う場合について述べる。

3.4.1.2 ディレクトリ移動

ディレクトリ \$(FDPS)/sample/fortran/nbody に移動する。

3.4.1.3 Makefile の編集

サンプルコードのディレクトリには 2 つの `Makefile` がある。1 つは GCC 用に書かれた `Makefile` であり、もう 1 つは Intel コンパイラ用に書かれた `Makefile.intel` である。ここでは `Makefile` について詳しく解説し、`Makefile.intel` に関しては使用上の注意点を本節最後で述べるのみとする。

まず、`Makefile` の初期設定について説明する。サンプルコードをコンパイルするにあたって、ユーザが設定すべき `Makefile` 変数は 4 つあり、Fortran コンパイラを表す `FC`、C++ コンパイラを表す `CXX`、それぞれのコンパイルオプションを表す `FCFLAGS`、`CXXFLAGS` である。これらの初期設定値は次のようにになっている：

```
FC=gfortran
CXX=g++
FCFLAGS = -std=f2003 -O3 -ffast-math -funroll-loops -finline-functions
CXXFLAGS = -O3 -ffast-math -funroll-loops $(FDPS_INC)
```

ここで、\$(FDPS_INC) は FDPS 本体をインクルードするために必要なインクルード PATH が格納された変数であり、`Makefile` 内で設定済みである。したがって、ここで変更する必要はない。

上記 4 つの `Makefile` 変数の値を適切に編集し、`make` コマンドを実行することで実行ファイルが得られる。OpenMP と MPI を使用するかどうかで編集方法が変わるために、以下でそれを説明する。

- OpenMP も MPI も使用しない場合
 - 変数 `FC` に Fortran コンパイラを代入する
 - 変数 `CXX` に C++ コンパイラを代入する
- OpenMP のみ使用の場合

- 変数 FC に OpenMP 対応の Fortran コンパイラを代入する
- 変数 CXX に OpenMP 対応の C++コンパイラを代入する
- FCFLAGS += -DPARTICLE_SIMULATOR_THREAD_PARALLEL -fopenmp の行のコメントアウトを外す
- CXXFLAGS += -DPARTICLE_SIMULATOR_THREAD_PARALLEL -fopenmp の行のコメントアウトを外す

- MPI のみ使用の場合

- 変数 FC に MPI 対応の Fortran コンパイラを代入する
- 変数 CXX に MPI 対応の C++コンパイラを代入する
- FCFLAGS += -DPARTICLE_SIMULATOR_MPI_PARALLEL の行のコメントアウトを外す
- CXXFLAGS += -DPARTICLE_SIMULATOR_MPI_PARALLEL の行のコメントアウトを外す

- OpenMP と MPI の同時使用の場合

- 変数 FC に MPI 対応の Fortran コンパイラを代入する
- 変数 CXX に MPI 対応の C++コンパイラを代入する
- FCFLAGS += -DPARTICLE_SIMULATOR_THREAD_PARALLEL -fopenmp の行のコメントアウトを外す
- FCFLAGS += -DPARTICLE_SIMULATOR_MPI_PARALLEL の行のコメントアウトを外す
- CXXFLAGS += -DPARTICLE_SIMULATOR_THREAD_PARALLEL -fopenmp の行のコメントアウトを外す
- CXXFLAGS += -DPARTICLE_SIMULATOR_MPI_PARALLEL の行のコメントアウトを外す

次に、ユーザが本 Makefile をユーザコードで使用する場合に便利な情報を記述する。ユーザコードで使用する場合に最も重要な Makefile 変数は、FDPS_LOC, SRC_USER_DEFINED_TYPE, SRC_USER の 3 つである。まず、変数 FDPS_LOC には、FDPS のトップディレクトリの PATH を格納する。本 Makefile では、FDPS のソースディレクトリの PATH や Fortran とのインターフェースコードを生成するスクリプトの PATH 等、FDPS に関連する各種な設定がこの変数の値に基いて自動的に設定されるようになっている。したがって、ユーザは適切に設定する必要がある。次に、変数 SRC_USER_DEFINED_TYPE, SRC_USER には、それぞれ、ユーザ定義型が記述された Fortran ファイル名と、ユーザ定義型以外の部分が記述された Fortran ファイル名を格納する。FDPS の Fortran インターフェースコードはユーザコードのクラス(派生型)を記述する部分から生成されるので、その部分が記述されたファイルを SRC_USER_DEFINED_TYPE で、それ以外を SRC_USER で指定する。これにより、SRC_USER で指定したファイルが変更されても FDPS の再コンパイルは起きなくなるので、コン

パイル・リンクの時間が短くなる。但し、SRC_USER_DEFINED_TYPE、或いは、SRC_USER に格納された（複数の）ファイルの間に依存関係がある場合、依存関係を示すルールを Makefile に追記しなければならない点に注意して頂きたい。この記述方法に関しては、例えば、GNU make のマニュアル等を読んで頂きたい。

最後に、Makefile.intel を使用する上での注意点について説明する。変数の初期値が異なる点を除き、Makefile.intel の構造は Makefile と同じである。したがって、変数の値をユーザが利用する計算機システムにおける値に適切に設定すれば、Makefile と同様に利用可能である。以下に変更する上での注意点を述べる：

- /opt/intel/bin を、利用する計算機システムにおける Intel コンパイラの格納ディレクトリの PATH に変更する。
- /opt/intel/include を、Intel コンパイラに付属するヘッダファイル群を格納したディレクトリの PATH に変更する。
- Makefile.intel の LDFLAGS は、-L/opt/intel/lib/intel64 -L/usr/lib64 -lifport -lifcore -limf -lsvml -lm -lipgo -lirc -lirc_s となっている。

この中の -lifcore ^{注 2)} は、C++ コンパイラで C++ オブジェクトと Fortran オブジェクトをリンクするため必要である ^{注 3)}。計算機システムのライブラリパスに、Intel コンパイラのライブラリ群が登録されていない場合、さらに、-L/opt/intel/lib/intel64 -L/usr/lib64 -lifport -limf -lsvml -lm -lipgo -lirc -lirc_s のような指定が必要である。

ここで、/opt/intel/lib/intel64 は、Intel コンパイラのライブラリ群が格納されたディレクトリの PATH で、/usr/lib64 はライブラリ libm を格納したディレクトリの PATH である。これらは利用する計算機システムに合わせて修正する必要がある。コンパイルに必要なライブラリ群 (-l*) は、Intel コンパイラのバージョンによって変わることもあるので確認して頂きたい。

- 本書を執筆時点 (2016/12/26) で、Intel コンパイラで OpenMP を有効にするオプションは -openmp、或いは、-qopenmp である。これは Intel コンパイラのバージョンによって異なり、より新しいバージョンのコンパイラは後者を使用する（前者を使用した場合、廃止予定の警告が出る）。
- 利用する計算機システムによっては、-lifcore の指定以外の設定が環境変数 (PATH, CPATH, LD_LIBRARY_PATH 等として) で既に行われていることもありえる。

3.4.1.4 make の実行

make コマンドを実行する。このとき、まず FDPS の Fortran インターフェースプログラムが生成され、その後、インターフェースプログラムとサンプルコードが一緒にコンパイルされる。

^{注 2)} libifcore は、Fortran ランタイムライブラリである。

^{注 3)} Intel コンパイラ（バージョン 17.0.0 20160721）において確認。

3.4.1.5 実行

実行方法は以下の通りである。

- MPI を使用しない場合、コマンドライン上で以下のコマンドを実行する

```
$ ./nbody.out
```

- MPI を使用する場合、コマンドライン上で以下のコマンドを実行する

```
$ MPIRUN -np NPROC ./nbody.out
```

ここで、MPIRUN には `mpirun` や `mpiexec` などが、NPROC には使用する MPI プロセスの数が入る。

正しく終了すると、以下のようなログを出力する。energy error は絶対値で 1×10^{-3} のオーダーに収まっているべき。

```
time: 9.5000000000E+000, energy error: -3.8046534069E-003
time: 9.6250000000E+000, energy error: -3.9711750200E-003
time: 9.7500000000E+000, energy error: -3.8223429428E-003
time: 9.8750000000E+000, energy error: -3.8843099298E-003
MemoryPool::finalize() is completed!
***** FDPS has successfully finished. *****
```

3.4.1.6 結果の解析

ディレクトリ `result` に粒子分布を出力したファイル ”`snap0000x-proc0000y.dat`” ができる。ここで `x` は整数で時刻に対応している。`y` は MPI プロセス番号を表しており、MPI 実行しなければ常に `y=0` である。

出力ファイルフォーマットは 1 列目から順に粒子の ID, 粒子の質量、位置の `x, y, z` 座標、粒子の `x, y, z` 軸方向の速度である。

ここで実行したのは、粒子数 1024 個からなる一様球（半径 3）のコールドコラプスである。コマンドライン上で以下のコマンドを実行すれば、時刻 9 における `xy` 平面に射影した粒子分布を見ることができる。

```
$ cd result
$ cat snap00009-proc* > snap00009.dat
$ gnuplot
> plot "snap00009.dat" using 3:4
```

他の時刻の粒子分布をプロットすると、一様球が次第に収縮し、その後もう一度膨張する様子を見ることができる（図 1 参照）。

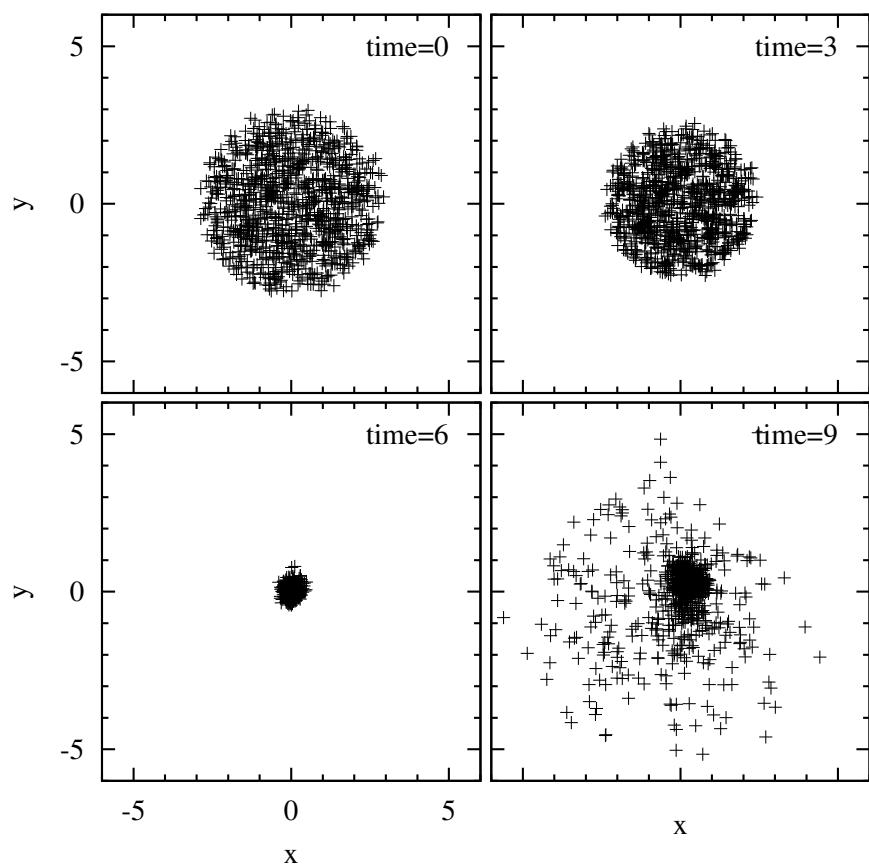


図 1:

粒子数を 10000 個にして計算を行いたい場合には、ファイル `f_main.F90` の中のサブルーチン `f_main()` のパラメータ変数 `ntot` を 10000 に設定し、再度、コンパイルした上で実行すればよい。

3.4.1.7 x86 版 Phantom-GRAPE を使う場合

Phantom-GRAPE は SIMD 命令を効率的に活用することで重力相互作用の計算を高速に実行するライブラリである（詳細は Tanikawa et al.[2012, New Astronomy, 17, 82] と Tanikawa et al.[2012, New Astronomy, 19, 74] を参照のこと）。

まず、使用環境を確認する。SIMD 命令セット AVX をサポートする Intel CPU または AMD CPU を搭載したコンピュータを使用しているならば、x86 版 Phantom-GRAPE を使用可能である。

次にディレクトリ \$(FDPS)/src/phantom_grape_x86/G5/newton/libpg5 に移動して、ファイル `Makefile` を編集し、コマンド `make` を実行して Phantom-GRAPE のライブラリ `libpg5.a` を作る。

最後に、ディレクトリ \$(FDPS)/sample/fortran/nbody に戻り、ファイル `Makefile` 内の
' '#use_phantom_grape_x86 = yes' の '#' を消す。`make` を実行してコンパイルする（OpenMP, MPI の使用・不使用どちらにも対応）と、x86 版 Phantom-GRAPE を使用したコードができる。上と同様の方法で実行・結果の確認を行うとさきほどと同様の結果が得られる。

Intel Core i5-3210M CPU @ 2.50GHz の 2 コアで性能テスト（OpenMP 使用、MPI 不使用）をした結果、粒子数 8192 の場合に、Phantom-GRAPE を使うと、使わない場合に比べて、最大で 5 倍弱ほど高速なコードとなる。

3.4.1.8 PIKG を使う場合

PIKG は DSL(ドメイン固有言語) 記述から様々なアーキテクチャ向けに最適化された粒子間相互作用カーネルを生成するカーネルジェネレータである。

ディレクトリ \$(FDPS)/sample/fortran/nbody のファイル `Makefile` 内の
' '#use_pikg_x86 = yes' の '#' を消す。この状態で `make` を実行してコンパイルする（OpenMP, MPI の使用・不使用どちらにも対応）と、PIKG から生成されたカーネルを使用した実行ファイル `nbody.out` ができている。上と同様の方法で実行・結果の確認を行うとさきほどと同様の結果が得られる。

デフォルトでは、通常の Fortran コードと同等の `reference` モードの相互作用カーネルが生成される。`Makefile` 内の `#COVERSION_TYPE` とその直後にある `#CXXFLAGS` の行のコメントアウトを外すと、別のアーキテクチャ（AVX2 や AVX-512）向けにコードを生成できる。AVX2 モードを使う場合は、利用する CPU が AVX2 及び FMA に対応していないくてはならない。さらに AVX-512 モードを使う場合には利用する CPU が AVX-512F および AVX-512DQ に対応していないくてはならない。

3.4.2 SPH シミュレーションコード

本サンプルコードには標準 SPH 法が FDPS を使って実装されている。簡単のため、smoothing length は一定値を取ると仮定している。コードでは、3 次元の衝撃波管問題の初期条件を生成し、衝撃波管問題を実際に計算する。

3.4.2.1 概要

以下の手順で本コードを使用できる。

- ディレクトリ \$(FDPS)/sample/fortran/sph に移動
- カレントディレクトリにある Makefile を編集 (後述)
- コマンドライン上で make を実行
- sph.out ファイルの実行 (後述)
- 結果の解析 (後述)

3.4.2.2 ディレクトリ移動

ディレクトリ \$(FDPS)/sample/fortran/sph に移動する。

3.4.2.3 Makefile の編集

SPH サンプルコードにも、 N 体計算のサンプルコードの場合と同様、GCC と Intel コンパイラ用に 2 種類の Makefile が用意されている。編集の仕方は、 N 体計算の場合と同一なので、[第 3.4.1.3 節](#) を参照されたい。

3.4.2.4 make の実行

make コマンドを実行する。 N 体計算のときと同様、このとき、まず FDPS の Fortran インターフェースプログラムが生成され、その後、インターフェースプログラムとサンプルコードが一緒にコンパイルされる。

3.4.2.5 実行

実行方法は以下の通りである。

- MPI を使用しない場合、コマンドライン上で以下のコマンドを実行する

```
$ ./sph.out
```

- MPI を使用する場合、コマンドライン上で以下のコマンドを実行する

```
$ MPIRUN -np NPROC ./sph.out
```

ここで、MPIRUN には mpirun や mpiexec などが、NPROC には使用する MPI プロセスの数が入る。

正しく終了すると以下のようなログを出力する。

```
***** FDPS has successfully finished. *****
```

3.4.2.6 結果の解析

実行するとディレクトリ result にファイルが出力されている。ファイル名は”snap000x-proc000y.dat”となっている。ここで、x,y は整数で、それぞれ、時刻と MPI プロセス番号を表す。MPI 実行でない場合には、常に y=0 である。出力ファイルフォーマットは 1 列目から順に粒子の ID、粒子の質量、位置の x, y, z 座標、粒子の x, y, z 軸方向の速度、密度、内部エネルギー、圧力である。

コマンドライン上で以下のコマンドを実行すれば、横軸に粒子の x 座標、縦軸に粒子の密度をプロットできる（時刻は 40）。

```
$ cd result  
$ cat snap00040-proc* > snap00040.dat  
$ gnuplot  
> plot "snap00040.dat" using 3:9
```

正しい答が得られれば、図 2 のような図を描ける。

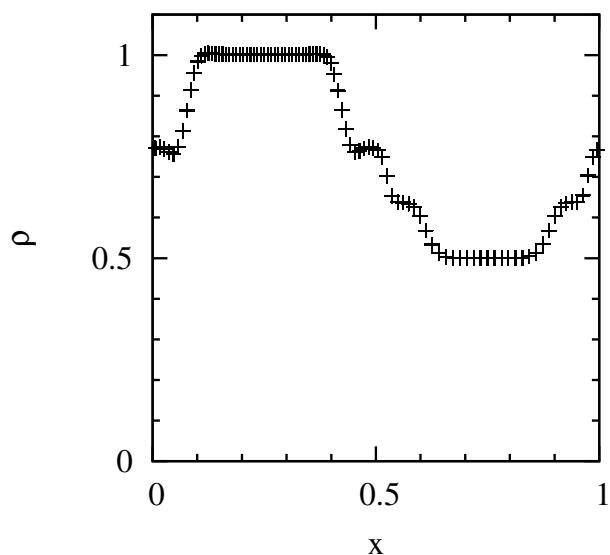


図 2: 衝撃波管問題の時刻 $t = 40$ における密度分布

4 サンプルコードの解説

本節では、前節(第3節)で動かしたサンプルコードについての解説を行う。特に、ユーザが定義しなければならない派生データ型(以後、ユーザ定義型と呼ぶ)やFDPSの各種APIの使い方について詳しく述べる。説明の重複を避けるため、いくつかの事項に関しては、その詳細な説明がN体シミュレーションコードの節でのみ行われている。そのため、SPHシミュレーションだけに興味があるユーザも、N体シミュレーションコードの節に目を通して頂きたい。

4.1 N体シミュレーションコード

4.1.1 ソースファイルの場所と構成

ソースファイルは\$(FDPS)/sample/fortran/nbody 以下にある。サンプルコードは、次節で説明するユーザ定義型が記述されたソースコード `user_defined.F90` と、N体シミュレーションのメインループ等が記述されたソースコード `f_main.F90` から構成される。この他に、GCCとIntelコンパイラ用のMakefileである `Makefile` と `Makefile.intel` がある。

4.1.2 ユーザー定義型・ユーザ定義関数

本節では、FDPSの機能を用いてN体計算を行う際、ユーザーが記述しなければならない派生データ型とサブルーチンについて記述する。

4.1.2.1 FullParticle型

ユーザーはユーザ定義型の1つFullParticle型を記述しなければならない。FullParticle型には、シミュレーションを行うにあたって、N体粒子が持っているべき全ての物理量が含まれている。Listing 1に本サンプルコードのFullParticle型の実装例を示す(`user_defined.F90`を参照)。

Listing 1: FullParticle型

```

1 type, public, bind(c) :: full_particle !$fdps FP,EPI,EPJ,Force
2   !$fdps copyFromForce full_particle (pot,pot) (acc,acc)
3   !$fdps copyFromFP full_particle (id,id) (mass,mass) (pos,pos)
4   !$fdps clear id=keep, mass=keep, pos=keep, vel=keep
5   integer(kind=c_long_long) :: id
6   real(kind=c_double) mass !$fdps charge
7   type(fdps_f64vec) :: pos !$fdps position
8   type(fdps_f64vec) :: vel !$fdps velocity
9   real(kind=c_double) :: pot
10  type(fdps_f64vec) :: acc
11 end type full_particle

```

FDPS Fortran インターフェースを使ってユーザコードを開発する場合、ユーザは派生データ型がどのユーザ定義型 (FullParticle 型, EssentialParticleI 型, EssentialParticleJ 型, Force 型) に対応するかを FDPS に教えなければならない。本インターフェースにおいて、この指示は、派生データ型に決まった書式のコメント文を加えることによって行う(以後、この種のコメント文を FDPS 指示文と呼ぶ)。本サンプルコードでは、FullParticle 型が EssentialParticleI 型、EssentialParticleJ 型、そして、Force 型を兼ねている。そのため、派生データ型がすべてのユーザ定義型に対応すること指示する以下のコメント文を記述している:

```
type, public, bind(c) :: full_particle !$fdps FP,EPI,EPJ,Force
```

また、FDPS は FullParticle 型のどのメンバ変数が質量や位置等の必須物理量 (どの粒子計算でも必ず必要となる物理量、或いは、特定の粒子計算において必要とされる物理量と定義する) に対応するのかを知っていなければならない。この指示も決まった書式のコメント文をメンバ変数に対して記述することで行う。今回の例では、メンバ変数 mass, pos, vel が、それぞれ、質量、位置、速度に対応することを FDPS に指示するため、以下の指示文が記述されている:

```
real(kind=c_double) :: mass !$fdps charge
type(fdps_f64vec) :: pos !$fdps position
type(fdps_f64vec) :: vel !$fdps velocity
```

ただし、メンバ変数が速度であることを指示する !\$fdps velocity は予約語であり、指示は任意である(現時点で FDPS の振舞に一切影響しない)。

FullParticle 型は EssentialParticleI 型、EssentialParticleJ 型、Force 型との間でデータの移動(データコピー)を行う。ユーザはこのコピーの仕方を指示する FDPS 指示文も記述しなければならない。本サンプルコードでは、以下のように記述している:

```
!$fdps copyFromForce full_particle (pot,pot) (acc,acc)
!$fdps copyFromFP full_particle (id,id) (mass,mass) (pos,pos)
```

ここで、キーワード copyFromForce を含む指示文は、Force 型のどのメンバ変数を FullParticle 型のどのメンバ変数にコピーするのかを指示するもので、FullParticle 型に常に記述しなければならない指示文である。一方、キーワード copyFromFP は FullParticle 型から EssentialParticleI 型および EssentialParticleJ 型へのデータコピーの仕方を指示するもので、EssentialParticleI 型と EssentialParticleJ 型には必ず記述しなければならない指示文である。今、FullParticle 型はこれら 2 つを兼ねているため、ここに記述している。

今、FullParticle 型は Force 型を兼ねている。Force 型にも必ず記述しなければならない指示文がある。それは、相互作用計算において、積算対象のメンバ変数をどのように 0 クリアするかを指示する指示文である。本サンプルコードでは、積算対象である加速度とポテンシャルのみを 0 クリアすることを指示するため、次の指示文を記述している:

```
!$fdps clear id=keep, mass=keep, pos=keep, vel=keep
```

ここで、キーワード `clear` の右に記述された構文 `mbr=keep` は、メンバ変数 `mbr` の値を変更しないことを指示する構文である。

FDPS 指示文の書式の詳細については、仕様書 `doc_specs_ftn_ja.pdf` をご覧頂きたい。

4.1.2.2 相互作用関数 calcForceEpEp

ユーザーは粒子間相互作用の仕方を記述した相互作用関数 `calcForceEpEp` を記述しなければならない。サブルーチン `calcForceEpEp` には、粒子-粒子相互作用計算の具体的な内容を書く必要がある。Listing 2 に、本サンプルコードでの実装を示す (`user_defined.F90` を参照)。

Listing 2: 関数 calcForceEpEp

```

1 subroutine calc_gravity_ep_ep(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
2   implicit none
3   integer(c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
4   type(full_particle), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
5   type(full_particle), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
6   type(full_particle), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
7   !* Local variables
8   integer(c_int) :: i,j
9   real(c_double) :: eps2,poti,r3_inv,r_inv
10  type(fdps_f64vec) :: xi,ai,rij
11
12  !* Compute force
13  eps2 = eps_grav * eps_grav
14  do i=1,n_ip
15    xi = ep_i(i)%pos
16    ai = 0.0d0
17    poti = 0.0d0
18    do j=1,n_jp
19      rij%x = xi%x - ep_j(j)%pos%x
20      rij%y = xi%y - ep_j(j)%pos%y
21      rij%z = xi%z - ep_j(j)%pos%z
22      r3_inv = rij%x*rij%x &
23        + rij%y*rij%y &
24        + rij%z*rij%z &
25        + eps2
26      r_inv = 1.0d0/sqrt(r3_inv)
27      r3_inv = r_inv * r_inv
28      r_inv = r_inv * ep_j(j)%mass
29      r3_inv = r3_inv * r_inv
30      ai%x = ai%x - r3_inv * rij%x
31      ai%y = ai%y - r3_inv * rij%y
32      ai%z = ai%z - r3_inv * rij%z
33      poti = poti - r_inv
34      ! [IMPORTANT NOTE]
35      ! In the innermost loop, we use the components of vectors
36      ! directly for vector operations because of the following
37      ! reason. Except for intel compilers with '-ipo' option,
38      ! most of Fortran compilers use function calls to perform
39      ! vector operations like rij = x - ep_j(j)%pos.
40      ! This significantly slow downs the speed of the code.

```

```

41      ! By using the components of vector directly, we can avoid
42      ! these function calls.
43  end do
44  f(i)%pot = f(i)%pot + poti
45  f(i)%acc = f(i)%acc + ai
46  end do
47
48 end subroutine calc_gravity_ep_ep

```

本サンプルコードでは、サブルーチン calc_gravity_ep_ep として実装されている。サブルーチンの仮引数は、EssentialParticleI の配列、EssentialParticleI の個数、EssentialParticleJ の配列、EssentialParticleJ の個数、Force 型の配列である。本サンプルコードでは、FullParticle 型がすべてのユーザ定義型を兼ねているため、引数のデータ型はすべて full_particle 型となっていることに注意して頂きたい。

4.1.2.3 相互作用関数 calcForceEpSp

ユーザーは粒子-超粒子間相互作用の仕方を記述した相互作用関数 calcForceEpSp を記述しなければならない。calcForceEpSp には、粒子-超粒子相互作用計算の具体的な内容を書く必要があり、サブルーチンとして実装しなければならない。Listing 3 に、本サンプルコードでの実装を示す (user_defined.F90 を参照)。

Listing 3: 関数 calcForceEpSp

```

1 subroutine calc_gravity_ep_sp(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
2   implicit none
3   integer(c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
4   type(full_particle), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
5   type(fdps_spj_monopole), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
6   type(full_particle), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
7   !* Local variables
8   integer(c_int) :: i,j
9   real(c_double) :: eps2,poti,r3_inv,r_inv
10  type(fdps_f64vec) :: xi,ai,rij
11
12  eps2 = eps_grav * eps_grav
13  do i=1,n_ip
14    xi = ep_i(i)%pos
15    ai = 0.0d0
16    poti = 0.0d0
17    do j=1,n_jp
18      rij%x = xi%x - ep_j(j)%pos%x
19      rij%y = xi%y - ep_j(j)%pos%y
20      rij%z = xi%z - ep_j(j)%pos%z
21      r3_inv = rij%x*rij%x &
22                  + rij%y*rij%y &
23                  + rij%z*rij%z &
24                  + eps2
25      r_inv = 1.0d0/sqrt(r3_inv)
26      r3_inv = r_inv * r_inv
27      r_inv = r_inv * ep_j(j)%mass
28      r3_inv = r3_inv * r_inv

```

```

29         ai%x = ai%x - r3_inv * rij%x
30         ai%y = ai%y - r3_inv * rij%y
31         ai%z = ai%z - r3_inv * rij%z
32         poti = poti - r_inv
33     end do
34     f(i)%pot = f(i)%pot + poti
35     f(i)%acc = f(i)%acc + ai
36   end do
37
38 end subroutine calc_gravity_ep_sp

```

本サンプルコードでは、サブルーチン `calc_gravity_ep_sp` として実装されている。サブルーチンの仮引数は、`EssentialParticleI` の配列、`EssentialParticleI` の個数、超粒子の配列、超粒子の個数、`Force` 型の配列である。本サンプルコードでは、`FullParticle` 型がすべてのユーザ定義型を兼ねているため、引数の `Force` 型は `full_particle` 型となっていることに注意して頂きたい。ここで指定する超粒子型はこの相互作用計算を実施するのに使用するツリーオブジェクトの種別と適合していなければならない。

4.1.3 プログラム本体

本節では、FDPS Fortran インターフェースを用いて N 体計算を行うにあたり、“メインルーチン” `f_main()` に書かれるべきサブルーチンや関数に関して解説する。ここで、メインルーチンとはっきり書かないので、次の理由による：FDPS Fortran インターフェースを使用する場合、ユーザコードは必ずサブルーチン `f_main()` の下に記述されなければならず、ユーザコードは正しい意味でのメインルーチンを持たない（メインルーチンはインターフェースプログラムの C++ ソースコード内にある）。しかし、実質的にはサブルーチン `f_main()` がメインルーチンの役割を果たす。そのため、敢えて“メインルーチン”という言葉を使った。メインルーチンという言葉は、それがユーザコードの入り口であることを示すのに適しているので、以後、`f_main()` をメインルーチンと呼ぶことにする。本サンプルコードのメインルーチンは `f_main.F90` に記述されている。

4.1.3.1 `fdps_controller` 型オブジェクトの生成

FDPS Fortran インターフェースにおいて、FDPS の API はすべて Fortran 2003 のクラス `FDPS_controller` のメンバ関数として提供される。このクラスは、インターフェースプログラムの 1 つである `FDPS_module.F90` の中の、モジュール `fdps_module` 内で定義されている。したがって、ユーザは FDPS の API を使用するために、`FDPS_controller` 型オブジェクトを生成しなければならない。本サンプルコードでは、`FDPS_controller` 型オブジェクト `fdps_ctrl` をメインルーチンで生成している：

Listing 4: `fdps_controller` 型オブジェクトの生成

```

1 subroutine f_main()
2   use fdps_module
3   implicit none
4   !* Local variables

```

```

5   type(fdps_controller) :: fdps_ctrl
6
7   ! Do something
8
9 end subroutine f_main

```

ここに示したコードは実際にサンプルコードから必要な部分だけを取り出したものであることに注意して頂きたい。

上記の理由から、以下の説明において、FDPS の API はこのオブジェクトのメンバ関数として呼び出されていることに注意されたい。

4.1.3.2 開始、終了

まずは、FDPS の初期化/開始を行う必要がある。次のように、メインルーチンに記述する。

Listing 5: FDPS の開始

```

1 call fdps_ctrl%ps_initialize()

```

FDPS は、開始したら明示的に終了させる必要がある。今回は、プログラムの終了と同時に FDPS も終了させるため、メインルーチンの最後に次のように記述する。

Listing 6: FDPS の終了

```

1 call fdps_ctrl%ps_finalize()

```

4.1.3.3 オブジェクトの生成・初期化

FDPS の初期化に成功した場合、ユーザーはコード中で用いるオブジェクトを作成する必要がある。本節では、オブジェクトの生成/初期化の仕方について解説する。

4.1.3.3.1 オブジェクトの生成

今回の計算では、粒子群オブジェクト、領域情報オブジェクトに加え、重力計算用のツリー オブジェクトを 1 個生成する必要がある。Fortran インターフェースでは、これらオブジェクトはすべて整数変数に格納された識別番号を使って操作する。したがって、まず識別番号を格納する整数変数を用意したあとに、オブジェクトを生成する API を呼び出す必要がある。以下にそのコードを記す。これらはサンプルコード `f_main.F90` のメインルーチン内に記述されている。

Listing 7: オブジェクトの生成

```

1 subroutine f_main()
2   use fdps_module
3   use user_defined_types
4   implicit none
5   !* Local variables
6   integer :: psys_num, dinfo_num, tree_num

```

```

7
8  !* Create FDPS objects
9  call fdps_ctrl%create_dinfo(dinfo_num)
10 call fdps_ctrl%create_psys(psys_num, 'full_particle')
11 call fdps_ctrl%create_tree(tree_num, &
12                           "Long,full_particle,full_particle,
13                           full_particle,Monopole")
14 end subroutine f_main

```

ここでも、実際のサンプルコードから該当部分だけを抜き出していることに注意して頂きたい。

上に示すように、粒子群オブジェクトを生成する際には FullParticle 型に対応する派生データ型名を文字列として API の引数に渡す必要がある。同様に、ツリーオブジェクト生成の際には、ツリーの種別を示す文字列を API の引数に渡す必要がある。両 API において、派生データ型名は小文字で入力されなければならない。

4.1.3.3.2 領域情報オブジェクトの初期化

ユーザーはオブジェクトを作成したら、そのオブジェクトの初期化を行う必要がある。本サンプルコードでは周期境界等は用いていないため、領域情報オブジェクトの初期化は API `init_dinfo` を実行するだけでよい:

Listing 8: 領域オブジェクトの初期化

```

1 call fdps_ctrl%init_dinfo(dinfo_num,coef_ema)

```

ここで、API `init_dinfo` の第 2 引数は領域分割に使用される指数移動平均の平滑化係数を表す。この係数の意味については仕様書に詳しい解説があるので、そちらを参照されたい。

4.1.3.3.3 粒子群オブジェクトの初期化

次に、粒子群オブジェクトの初期化を行う必要がある。粒子群オブジェクトの初期化は、API `init_psys` で行う:

Listing 9: 粒子群オブジェクトの初期化

```

1 call fdps_ctrl%init_psys(psys_num)

```

4.1.3.3.4 ツリーオブジェクトの初期化

次に、ツリーオブジェクトの初期化を行う必要がある。ツリーオブジェクトの初期化は API `init_tree` で行う。この API には、引数としてツリーオブジェクト内部で使用する配列の大きさの初期値を渡す必要がある。これはローカル粒子数 (`n_loc`) 程度で十分であるため、そのようにセットする:

Listing 10: ツリーオブジェクトの初期化

```

1 call fdps_ctrl%init_tree(tree_num,n_loc,theta,
2                           n_leaf_limit,n_group_limit)

```

この API には 3 つの省略可能引数が存在し、サンプルコードではこれらを省略せずに指定している:

- theta — ツリー法で力の計算をする場合の見込み角についての基準
- n_leaf_limit — ツリーを切るのをやめる粒子数の上限
- n_group_limit — 相互作用リストを共有する粒子数の上限

4.1.3.4 粒子データの初期化

初期条件の設定を行うためには、粒子群オブジェクトに粒子データを入力する必要がある。(既に API `init_ps` で初期化済みの) 粒子群オブジェクトに、`FullParticle` 型粒子のデータを格納するには、粒子群オブジェクトの API `set_nptcl_loc` と `get_ps``s_fptr` を用いて、次のように行う:

Listing 11: 粒子データの初期化

```

1 subroutine foo(fdps_ctrl,psys_num)
2   use fdps_vector
3   use fdps_module
4   use user_defined_types
5   implicit none
6   type(fdps_controller), intent(IN) :: fdps_ctrl
7   integer, intent(IN) :: psys_num
8   !* Local variables
9   integer :: i,nptcl_loc
10  type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
11
12  !* Set # of local particles
13  call fdps_ctrl%set_nptcl_loc(psys_num,nptcl_loc)
14
15  !* Get the pointer to full particle data
16  call fdps_ctrl%get_ps_fptr(psys_num,ptcl)
17
18  !* Initialize particle data
19  do i=1,nptcl_loc
20    ptcl(i)%pos = ! Do something
21  end do
22
23  !* Release the pointer
24  nullify(ptcl)
25
26 end subroutine foo

```

まず、粒子群オブジェクトに粒子データを保存するのに必要なメモリを確保しなければならない。これを行うには API `set_nptcl_loc` を実行すればよい。この API は指定された粒子群オブジェクトのローカル粒子数(自プロセスが管理する粒子数)の値を設定し、かつ、その粒子数を格納するのに必要なメモリを確保する。粒子データを初期化するためには、確保さ

れたメモリのアドレスを取得しなければならない。これには API `get_psyst_fptr` を使用する。アドレスは Fortran ポインタで受け取る必要がある。そのため、上記の例では、ポインタを以下のように用意している:

```
type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
```

API `get_psyst_fptr` によってポインタを設定した後は、ポインタを粒子配列のように使用することが可能である。上の例では、粒子データの設定が完了した後、ポインタを組込関数 `nullify` によって解放している。

4.1.3.5 ループ

本節では、時間積分ループの中で行わなければならないことについて、解説する。

4.1.3.5.1 領域分割の実行

まずは、粒子分布に基いて、領域分割を実行する。本サンプルコードでは、これを領域情報オブジェクトの API `decompose_domain_all` を用いて行っている:

Listing 12: 領域分割の実行

```
1 if (mod(num_loop,4) == 0) then
2   call fdps_ctrl%decompose_domain_all(dinfo_num,psys_num)
3 end if
```

ここで、計算時間の節約のため、領域分割は 4 ループ毎に 1 回だけ行うようにしている。

4.1.3.5.2 粒子交換の実行

次に、領域情報に基いて、プロセス間の粒子の情報を交換する。これには、粒子群オブジェクトの API `exchange_particle` を用いる:

Listing 13: 粒子交換の実行

```
1 call fdps_ctrl%exchange_particle(psys_num,dinfo_num)
```

4.1.3.5.3 相互作用計算の実行

領域分割・粒子交換が終了したら、相互作用の計算を行う。これには、ツリーオブジェクトの API `calc_force_all_and_write_back` を用いる:

Listing 14: 相互作用計算の実行

```
1 subroutine f_main()
2   use, intrinsic :: iso_c_binding
3   use user_defined_types
4   implicit none
```

```

5  !* Local variables
6  type(c_funptr) :: pfunc_ep_ep, pfunc_ep_sp
7
8  ! Do something
9
10 pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_gravity_ep_ep)
11 pfunc_ep_sp = c_funloc(calc_gravity_ep_sp)
12 call fdps_ctrl%calc_force_all_and_write_back(tree_num,      &
13                                              pfunc_ep_ep,      &
14                                              pfunc_ep_sp,      &
15                                              psys_num,        &
16                                              dinfo_num)
17
18 ! Do something
19
20 end subroutine f_main

```

ここで、API の第 2,3 引数には関数 calcForceEpEp, calcForceEpSp の (C 言語アドレス^{注 4)} としての) 関数ポインタを指定する。関数の C 言語アドレスは、Fortran 2003 で導入された組込関数 c_funloc を使って取得する (この組込み関数はモジュール iso_c_binding で提供されるため、use 文を使い、このモジュールを利用可能にしている)。C 言語アドレスを格納するためには、同じく Fortran 2003 で導入された派生データ型 c_funptr の変数が必要である。そのため、本サンプルコードでは、c_funptr 型変数として、pfunc_ep_ep と pfunc_ep_sp を用意している。ここに、calc_gravity_ep_ep と calc_gravity_ep_sp の C 言語アドレスを格納した上で、API に渡している。

4.1.3.5.4 時間積分

本サンプルコードでは、時間積分を Leapfrog 時間積分法によって行う。時間積分は形式的に、 $K(\frac{\Delta t}{2})D(\Delta t)K(\frac{\Delta t}{2})$ と表される。ここで、 Δt は時間刻み、 $K(\cdot)$ は速度を指定された時間だけ時間推進するオペレータ、 $D(\cdot)$ は位置を指定された時間だけ時間推進するオペレータである。本サンプルコードにおいて、これらのオペレータは、サブルーチン kick とサブルーチン drift として実装している。

時間積分ループの最初で、最初の $D(\Delta t)K(\frac{\Delta t}{2})$ の計算を行い、粒子の座標と速度の情報を更新している：

Listing 15: $D(\Delta t)K(\frac{\Delta t}{2})$ オペレータの計算

```

1  !* Leapfrog: Kick-Drift
2  call kick(fdps_ctrl, psys_num, 0.5d0*dt)
3  time_sys = time_sys + dt
4  call drift(fdps_ctrl, psys_num, dt)

```

時間積分ループの次の部分では、力の計算を行い、その後、最後の $K(\frac{\Delta t}{2})$ の計算を行っている：

Listing 16: $K(\frac{\Delta t}{2})$ オペレータの計算

^{注 4)}C 言語方式で記述されたアドレス情報のこと。

```

1 !* Leapfrog: Kick
2 call kick(fdps_ctrl, psys_num, 0.5d0*dt)

```

4.1.3.6 粒子データの更新

上記で説明した `kick` や `drift` 等のサブルーチンで、粒子データを更新するためには、粒子群オブジェクトに格納されている粒子データにアクセスする必要がある。これは、第 4.1.3.4 節で説明した方法とほぼ同様に行う：

Listing 17: 粒子データの更新

```

1 subroutine foo(fdps_ctrl, psys_num)
2   use fdps_vector
3   use fdps_module
4   use user_defined_types
5   implicit none
6   type(fdps_controller), intent(IN) :: fdps_ctrl
7   integer, intent(IN) :: psys_num
8   !* Local variables
9   integer :: i, nptcl_loc
10  type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
11
12  !* Get # of local particles
13  nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num)
14
15  !* Get the pointer to full particle data
16  call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num, ptcl)
17
18  !* Initialize or update particle data
19  do i=1, nptcl_loc
20    ptcl(i)%pos = ! Do something
21  end do
22
23  !* Release the pointer
24  nullify(ptcl)
25
26 end subroutine foo

```

API `get_psys_fptr` を使い、粒子群オブジェクトに格納された粒子データのアドレスをポインタとして受け取る。受け取ったポインタは要素数 `nptcl_loc` の粒子配列として振る舞うので、一般的な配列同様に値を更新すればよい。

4.1.4 ログファイル

計算が正しく開始すると、標準出力に、時間・エネルギー誤差の 2 つが出力される。以下はその出力の最も最初のステップでの例である。

Listing 18: 標準出力の例

```

1 time: 0.0000000000E+000, energy error: -0.0000000000E+000

```

4.2 固定長SPHシミュレーションコード

本節では、前節(第3節)で使用した、固定 smoothing length での標準 SPH 法のサンプルコードの詳細について解説する。

4.2.1 ソースファイルの場所と構成

ソースファイルは\$(FDPS)/sample/fortran/sph 以下にある。サンプルコードは、次節で説明するユーザ定義型が記述されたソースコード `user_defined.F90` と、SPHシミュレーションのメインループ等が記述されたソースコード `f_main.F90` から構成される。この他に、GCC と Intel コンパイラ用の Makefile である `Makefile` と `Makefile.intel` がある。

4.2.2 ユーザー定義型・ユーザ定義関数

本節では、FDPS の機能を用いて SPH の計算を行う際に、ユーザーが記述しなければならない派生データ型とサブルーチンについて記述する。

4.2.2.1 FullParticle 型

ユーザーはユーザ定義型の1つ FullParticle 型を記述しなければならない。FullParticle 型には、シミュレーションを行うにあたって、SPH 粒子が持っているべき全ての物理量が含まれている。Listing 19 に本サンプルコード中で用いる FullParticle 型の実装例を示す(`user_defined.F90` を参照)。

Listing 19: FullParticle 型

```

1 !*** Full particle type
2 type, public, bind(c) :: full_particle !$fdps FP
3   !$fdps copyFromForce force_dens (dens,dens)
4   !$fdps copyFromForce force_hydro (acc,acc) (eng_dot,eng_dot) (dt,dt)
5   real(kind=c_double) :: mass !$fdps charge
6   type(fdps_f64vec) :: pos !$fdps position
7   type(fdps_f64vec) :: vel
8   type(fdps_f64vec) :: acc
9   real(kind=c_double) :: dens
10  real(kind=c_double) :: eng
11  real(kind=c_double) :: pres
12  real(kind=c_double) :: smth !$fdps rsearch
13  real(kind=c_double) :: snds
14  real(kind=c_double) :: eng_dot
15  real(kind=c_double) :: dt
16  integer(kind=c_long_long) :: id
17  type(fdps_f64vec) :: vel_half
18  real(kind=c_double) :: eng_half
19 end type full_particle

```

SPH サンプルコードでは N 体サンプルコードと異なり、FullParticle 型が他のユーザ定義型を兼ねることはない。したがって、この派生データ型が FullParticle 型であることを示すため、次の指示文を記述している：

```
type, public, bind(c) :: full_particle !$fdps FP
```

SPH シミュレーションにおける相互作用は短距離力である。そのため、必須物理量として探索半径が加わる。粒子位置等の指定も含め、どのメンバ変数がどの必須物理量に対応しているかの指定を次の指示文で行っている：

```
real(kind=c_double) :: mass !$fdps charge
type(fdps_f64vec) :: pos !$fdps position
real(kind=c_double) :: smth !$fdps rsearch
```

N 体シミュレーションコードの節で述べたように、メンバ変数が粒子速度であることを指定するキーワード velocity は予約語でしかないので、本サンプルコードでは指定していない。

FullParticle 型は Force 型との間でデータコピーを行う。ユーザは指示文を使い、FDPS にデータコピーの仕方を教えなければならない。後述するように本 SPH サンプルコードには 2 つの Force 型が存在する。したがって、ユーザはそれぞれの Force 型に対して、指示文を記述する必要がある。本サンプルコードでは、以下のように記述している：

```
!$fdps copyFromForce force_dens (dens,dens)
!$fdps copyFromForce force_hydro (acc,acc) (eng_dot,eng_dot) (dt,dt)
```

4.2.2.2 EssentialParticleI 型

ユーザーは EssentialParticleI 型を記述しなければならない。EssentialParticleI 型には、Force の計算を行う際、 i 粒子が持っているべき全ての物理量をメンバ変数として持っている必要がある。また、本サンプルコード中では、EssentialParticleJ 型も兼ねているため、 j 粒子が持っているべき全ての物理量もメンバ変数として持っている必要がある。Listing 20 に、本サンプルコードの EssentialParticleI 型の実装例を示す（user_defined.F90 参照）：

Listing 20: EssentialParticleI 型

```
1 !**** Essential particle type
2 type, public, bind(c) :: essential_particle !$fdps EPI,EPJ
3   !$fdps copyFromFP full_particle (id,id) (pos,pos) (vel,vel) (mass,
4     mass) (smth,smth) (dens,dens) (pres,pres) (sns,snds)
5   integer(kind=c_long_long) :: id !$fdps id
6   type(fdps_f64vec) :: pos !$fdps position
7   type(fdps_f64vec) :: vel
8   real(kind=c_double) :: mass !$fdps charge
9   real(kind=c_double) :: smth !$fdps rsearch
10  real(kind=c_double) :: dens
11  real(kind=c_double) :: pres
12  real(kind=c_double) :: sns
```

```
12    end type essential_particle
```

まず、ユーザは指示文を用いて、この派生データ型が EssentialParticleI 型かつ EssentialParticleJ 型であることを FDPS に教えなければならない。本サンプルコードでは、以下のように記述している：

```
type, public, bind(c) :: essential_particle !$fdps EPI,EPJ
```

次に、ユーザはこの派生データ型のどのメンバ変数がどの必須物理量に対応するのかを指示文によって指定しなければならない。今回は SPH シミュレーションを行うので探索半径の指定も必要である。本サンプルコードでは、以下のように記述している：

```
type(fdps_f64vec) :: pos !$fdps position
real(kind=c_double) :: mass !$fdps charge
real(kind=c_double) :: smth !$fdps rsearch
```

EssentialParticleI 型と EssentialParticleJ 型は FullParticle 型からデータを受け取る。ユーザは FullParticle 型のどのメンバ変数を EssentialParticle?型 (?=I,J) のどのメンバ変数にコピーするのかを、指示文を用いて指定する必要がある。本サンプルコードでは、以下のように記述している：

```
!$fdps copyFromFP full_particle (id,id) (pos,pos) (vel,vel) (mass,mass)
(smth,smth) (dens,dens) (pres,pres) (sns,snds)
```

4.2.2.3 Force 型

ユーザーは Force 型を記述しなければならない。Force 型には、Force の計算を行った際にその結果として得られる全ての物理量をメンバ変数として持っている必要がある。また、本サンプルコード中では、Force の計算は密度の計算と流体相互作用計算の 2 つが存在するため、Force 型は 2 つ書く必要がある。Listing 21 に、本サンプルコード中で用いる Force 型の実装例を示す。

Listing 21: Force 型

```
1  **** Force types
2  type, public, bind(c) :: force_dens !$fdps Force
3      !$fdps clear smth=keep
4      real(kind=c_double) :: dens
5      real(kind=c_double) :: smth
6  end type force_dens
7
8  type, public, bind(c) :: force_hydro !$fdps Force
9      !$fdps clear
10     type(fdps_f64vec) :: acc
11     real(kind=c_double) :: eng_dot
12     real(kind=c_double) :: dt
13  end type force_hydro
```

まず、ユーザはこれらの派生データ型が Force 型であることを指示文によって指定する必要がある。この実装例では、それぞれの派生データ型に対して、以下のように記述している：

```
type, public, bind(c) :: force_dens !$fdps Force
type, public, bind(c) :: force_hydro !$fdps Force
```

これらの派生データ型は Force 型であるから、ユーザは必ず、相互作用計算における積算対象のメンバ変数の初期化方法を指定する必要がある。本サンプルコードでは、積算対象である密度、(圧力勾配による) 加速度、エネルギー密度の変化率、時間刻みのみを 0 クリアする指示を出している：

```
!$fdps clear smth=keep
!$fdps clear
```

この例において、Force 型 force_dens には、smoothing length を表すメンバ変数 smth が用意されている。本来、固定長 SPH では、Force 型に smoothing length に対応するメンバを持たせる必要はない。しかし、ここでは、ユーザが将来的に可変長 SPH に移行することを想定して用意してある。可変長 SPH の formulation の 1 つである Springel [2005,MNRAS,364,1105] の方法では、密度計算と同時に smoothing length を計算する必要がある。そのような formulation を実装する場合には、この例のように、Force 型に smoothing length を持たせる必要が生じる。本サンプルコードでは固定長 SPH を使うため、smth を 0 クリアされないようにしている(0 クリアされては 2 回目以降の密度計算が破綻するため)。

4.2.2.4 相互作用関数 calcForceEpEp

ユーザーは粒子間相互作用の仕方を記述した相互作用関数 calcForceEpEp を記述しなければならない。相互作用関数 calcForceEpEp には、各 Force 型に対応する粒子-粒子相互作用計算の具体的な内容を書く必要がある。Listing 22 に、本サンプルコードでの実装を示す (user_defined.F90 を参照)。

Listing 22: 関数 calcForceEpEp

```
1 !**** Interaction function
2 subroutine calc_density(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
3     integer(kind=c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
4     type(essential_particle), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
5     type(essential_particle), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
6     type(force_dens), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
7     !* Local variables
8     integer(kind=c_int) :: i,j
9     type(fdps_f64vec) :: dr
10
11    do i=1,n_ip
12        f(i)%dens = 0.0d0
13        do j=1,n_jp
14            dr%x = ep_j(j)%pos%x - ep_i(i)%pos%x
15            dr%y = ep_j(j)%pos%y - ep_i(i)%pos%y
16            dr%z = ep_j(j)%pos%z - ep_i(i)%pos%z
```

```

17         f(i)%dens = f(i)%dens &
18             + ep_j(j)%mass * W(dr,ep_i(i)%smth)
19     end do
20 end do
21
22 end subroutine calc_density
23
24 !**** Interaction function
25 subroutine calc_hydro_force(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
26     integer(kind=c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
27     type(essential_particle), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
28     type(essential_particle), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
29     type(force_hydro), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
30     !* Local parameters
31     real(kind=c_double), parameter :: C_CFL=0.3d0
32     !* Local variables
33     integer(kind=c_int) :: i,j
34     real(kind=c_double) :: mass_i,mass_j,smth_i,smth_j, &
35                           dens_i,dens_j,pres_i,pres_j, &
36                           snds_i,snds_j
37     real(kind=c_double) :: povrho2_i,povrho2_j, &
38                           v_sig_max,dr_dv,w_ij,v_sig,AV
39     type(fdps_f64vec) :: pos_i,pos_j,vel_i,vel_j, &
40                           dr,dv,gradW_ij
41
42     do i=1,n_ip
43         !* Zero-clear
44         v_sig_max = 0.0d0
45         !* Extract i-particle info.
46         pos_i = ep_i(i)%pos
47         vel_i = ep_i(i)%vel
48         mass_i = ep_i(i)%mass
49         smth_i = ep_i(i)%smth
50         dens_i = ep_i(i)%dens
51         pres_i = ep_i(i)%pres
52         snds_i = ep_i(i)%snds
53         povrho2_i = pres_i/(dens_i*dens_i)
54         do j=1,n_jp
55             !* Extract j-particle info.
56             pos_j%x = ep_j(j)%pos%x
57             pos_j%y = ep_j(j)%pos%y
58             pos_j%z = ep_j(j)%pos%z
59             vel_j%x = ep_j(j)%vel%x
60             vel_j%y = ep_j(j)%vel%y
61             vel_j%z = ep_j(j)%vel%z
62             mass_j = ep_j(j)%mass
63             smth_j = ep_j(j)%smth
64             dens_j = ep_j(j)%dens
65             pres_j = ep_j(j)%pres
66             snds_j = ep_j(j)%snds
67             povrho2_j = pres_j/(dens_j*dens_j)
68             !* Compute dr & dv
69             dr%x = pos_i%x - pos_j%x
70             dr%y = pos_i%y - pos_j%y
71             dr%z = pos_i%z - pos_j%z

```

```

72      dv%x = vel_i%x - vel_j%x
73      dv%y = vel_i%y - vel_j%y
74      dv%z = vel_i%z - vel_j%z
75      !* Compute the signal velocity
76      dr_dv = dr%x * dv%x + dr%y * dv%y + dr%z * dv%z
77      if (dr_dv < 0.0d0) then
78          w_ij = dr_dv / sqrt(dr%x * dr%x + dr%y * dr%y + dr%z * dr%z
79          )
80      else
81          w_ij = 0.0d0
82      end if
83      v_sig = snds_i + snds_j - 3.0d0 * w_ij
84      v_sig_max = max(v_sig_max, v_sig)
85      !* Compute the artificial viscosity
86      AV = - 0.5d0*v_sig*w_ij / (0.5d0*(dens_i+dens_j))
87      !* Compute the average of the gradients of kernel
88      gradW_ij = 0.5d0 * (gradW(dr,smth_i) + gradW(dr,smth_j))
89      !* Compute the acceleration and the heating rate
90      f(i)%acc%x = f(i)%acc%x - mass_j*(povrho2_i+povrho2_j+AV)*
91          gradW_ij%x
92      f(i)%acc%y = f(i)%acc%y - mass_j*(povrho2_i+povrho2_j+AV)*
93          gradW_ij%y
94      f(i)%acc%z = f(i)%acc%z - mass_j*(povrho2_i+povrho2_j+AV)*
95          gradW_ij%z
96      f(i)%eng_dot = f(i)%eng_dot &
97          + mass_j * (povrho2_i + 0.5d0*AV) &
98          *(dv%x * gradW_ij%x &
99          +dv%y * gradW_ij%y &
100         +dv%z * gradW_ij%z)
101     end do
102     f(i)%dt = C_CFL*2.0d0*smth_i/(v_sig_max*kernel_support_radius)
103 end do
104 ! [IMPORTANT NOTE]
105 ! In the innermost loop, we use the components of vectors
106 ! directly for vector operations because of the following
107 ! reason. Except for intel compilers with '-ipo' option,
108 ! most of Fortran compilers use function calls to perform
109 ! vector operations like rij = x - ep_j(j)%pos.
110 ! This significantly slow downs the speed of the code.
111 ! By using the components of vector directly, we can avoid
112 ! these function calls.
113
114 end subroutine calc_hydro_force

```

本 SPH シミュレーションコードでは、2 種類の相互作用があるため、calcForceEpEp は 2 つ記述する必要がある。いずれの場合にも、サブルーチンの仮引数は、EssentialParticleI の配列、EssentialParticleI の個数、EssentialParticleJ の配列、EssentialParticleJ の個数、Force 型の配列である。

4.2.3 プログラム本体

本節では、FDPS を用いて SPH 計算を行う際に、メインルーチンに書かれるべき関数について解説する（本文書におけるメインルーチンの定義については、第 4.1.3 節を参照のこと）

。

4.2.3.1 fdps_controller型オブジェクトの生成

ユーザは FDPS の API を使用するために、FDPS_controller 型オブジェクトを生成しなければならない。本サンプルコードでは、FDPS_controller 型オブジェクト `fdps_ctrl` をメインルーチンで生成している:

Listing 23: fdps_controller型オブジェクトの生成

```

1 subroutine f_main()
2   use fdps_module
3   implicit none
4   !* Local variables
5   type(fdps_controller) :: fdps_ctrl
6
7   ! Do something
8
9 end subroutine f_main

```

ここに示したコードは実際にサンプルコードから必要な部分だけを取り出したものであることに注意して頂きたい。

上記の理由から、以下の説明において、FDPS の API はこのオブジェクトのメンバ関数として呼び出されていることに注意されたい。

4.2.3.2 開始、終了

まずは、FDPS の初期化/開始を行う必要がある。次のように、メインルーチンに記述する。

Listing 24: FDPS の開始

```

1 call fdps_ctrl%ps_initialize()

```

FDPS は、開始したら明示的に終了させる必要がある。今回は、プログラムの終了と同時に FDPS も終了させるため、メインルーチンの最後に次のように記述する。

Listing 25: FDPS の終了

```

1 call fdps_ctrl%PS_Finalize()

```

4.2.3.3 オブジェクトの生成・初期化

FDPS の初期化に成功した場合、ユーザーはコード中で用いるオブジェクトを作成する必要がある。本節では、オブジェクトの生成/初期化の仕方について、解説する。

4.2.3.3.1 オブジェクトの生成

SPH では、粒子群オブジェクト、領域情報オブジェクトに加え、密度計算用に Gather 型の短距離力用ツリーを 1 本、流体相互作用計算用に Symmetry 型の短距離力用ツリーを 1 本生成する必要がある。以下にそのコードを記す。

Listing 26: オブジェクトの生成

```

1 subroutine f_main()
2   use fdps_vector
3   use fdps_module
4   use user_defined_types
5   implicit none
6   !* Local variables
7   integer :: psys_num, dinfo_num
8   integer :: dens_tree_num, hydro_tree_num
9
10  !* Create FDPS objects
11  call fdps_ctrl%create_psys(psys_num, 'full_particle')
12  call fdps_ctrl%create_dinfo(dinfo_num)
13  call fdps_ctrl%create_tree(dens_tree_num, &
14    "Short, dens_force, essential_particle,
15    essential_particle, Gather")
16  call fdps_ctrl%create_tree(hydro_tree_num, &
17    "Short, hydro_force, essential_particle,
18    essential_particle, Symmetry")
18 end subroutine f_main

```

ここでも、実際のサンプルコードから該当部分だけを抜き出していることに注意して頂きたい。API `create_psys` と `create_tree` には、それぞれ、粒子種別とツリー種別を示す文字列を渡す。これら文字列の中のすべての派生データ型名は小文字で記述されなければならないことに注意して頂きたい。

4.2.3.3.2 領域情報オブジェクトの初期化

ユーザーはオブジェクトを作成したら、そのオブジェクトの初期化を行う必要がある。ここでは、まず領域情報オブジェクトの初期化について、解説する。領域情報オブジェクトの初期化が終わった後、領域情報オブジェクトに周期境界の情報と、境界の大きさをセットする必要がある。今回のサンプルコードでは、 x, y, z 方向に周期境界を用いる。

Listing 27: 領域情報オブジェクトの初期化

```

1 call fdps_ctrl%init_dinfo(dinfo_num, coef_ema)
2 call fdps_ctrl%set_boundary_condition(dinfo_num, fdps_bc_periodic_xyz)
3 call fdps_ctrl%set_pos_root_domain(dinfo_num, pos_ll, pos_ul)

```

4.2.3.3.3 粒子群オブジェクトの初期化

次に、粒子群オブジェクトの初期化を行う必要がある。粒子群オブジェクトの初期化は、次の二文だけでよい。

Listing 28: 粒子群オブジェクトの初期化

```
1 call fdps_ctrl%init_psys(psys_num)
```

4.2.3.3.4 ツリーオブジェクトの初期化

次に、ツリーオブジェクトの初期化を行う必要がある。ツリーオブジェクトの初期化を行う関数には、オブジェクト内部で使用する配列の大きさの初期値を渡す必要がある。初期値はローカル粒子数 (`n_loc`) 程度で十分であるため、そのようにセットする。

Listing 29: 相互作用ツリークラスの初期化

```
1 call fdps_ctrl%init_tree(dens_tree_num,n_loc,theta, &
2           n_leaf_limit,n_group_limit)
3 call fdps_ctrl%init_tree(hydro_tree_num,n_loc,theta, &
4           n_leaf_limit,n_group_limit)
```

4.2.3.4 ループ

本節では、時間積分ループの中で行わなければならないことについて、解説する。

4.2.3.4.1 領域分割の実行

まずは、粒子分布に基いて、領域分割を実行する。これには、領域情報オブジェクトの API `decompose_domain_all` を用いる。

Listing 30: 領域分割の実行

```
1 call fdps_ctrl%decompose_domain_all(dinfo_num,psys_num)
```

4.2.3.4.2 粒子交換の実行

次に、領域情報に基いて、プロセス間の粒子の情報を交換する。これには、粒子群オブジェクトの API `exchange_particle` を用いる。

Listing 31: 粒子交換の実行

```
1 call fdps_ctrl%exchange_particle(psys_num,dinfo_num)
```

4.2.3.4.3 相互作用計算の実行

領域分割・粒子交換が終了したら、相互作用の計算を行う。これには、ツリーオブジェクトの API `calc_force_all_and_write_back` を用いる。

Listing 32: 相互作用計算の実行

```

1 subroutine f_main()
2   use, intrinsic :: iso_c_binding
3   use user_defined_types
4   implicit none
5   !* Local variables
6   type(c_funptr) :: pfunc_ep_ep
7
8   ! Do something
9
10  pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_density)
11  call fdps_ctrl%calc_force_all_and_write_back(tree_num_dens, &
12                                              pfunc_ep_ep,      &
13                                              psys_num,        &
14                                              dinfo_num)
15  call set_pressure(fdps_ctrl, psys_num)
16  pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_hydro_force)
17  call fdps_ctrl%calc_force_all_and_write_back(tree_num_hydro, &
18                                              pfunc_ep_ep,      &
19                                              psys_num,        &
20                                              dinfo_num)
21
22   ! Do something
23
24 end subroutine f_main

```

ここで、API の第 2 引数には関数 `calcForceEpEp` の (C 言語アドレスとしての) 関数ポインタを指定する。

4.2.4 コンパイル

作業ディレクトリで `make` コマンドを打てばよい。Makefile としては、サンプルコードに付属の Makefile をそのまま用いる事にする。

\$ make

4.2.5 実行

MPI を使用しないで実行する場合、コマンドライン上で以下のコマンドを実行すればよい。

\$./sph.out

もし、MPI を用いて実行する場合は、以下のコマンドを実行すればよい。

```
$ MPIRUN -np NPROC ./sph.out
```

ここで、MPIRUN には mpirun や mpiexec などの MPI 実行プログラムが、NPROC にはプロセス数が入る。

4.2.6 ログファイル

計算が終了すると、result フォルダ下にログが出力される。

4.2.7 可視化

ここでは、gnuplot を用いた可視化の方法について解説する。gnuplot で対話モードに入るために、コマンドラインから gnuplot を起動する。

```
$ gnuplot
```

対話モードに入ったら、gnuplot を用いて可視化を行う。今回は、50番目のスナップショットファイルから、横軸を粒子の x 座標、縦軸を密度に取ったグラフを生成する。

```
gnuplot> plot "result/snap00050-proc00000.dat" u 3:9
```

ここで、文字列 proc の後の整数は MPI のプロセス番号を表す。

5 サンプルコード

5.1 N 体シミュレーション

N 体シミュレーションのサンプルコードを以下に示す。このサンプルは第 3, 4 節で用いた*N* 体シミュレーションのサンプルコードと同じものである。これをカット&ペーストしてコンパイルすれば、正常に動作する*N* 体シミュレーションコードを作ることができる。

Listing 33: *N* 体シミュレーションのサンプルコード (`user_defined.F90`)

```

1 !=====
2 ! MODULE: User defined types
3 !=====
4 module user_defined_types
5   use, intrinsic :: iso_c_binding
6   use fdps_vector
7   use fdps_super_particle
8   implicit none
9
10  !* Public variables
11  real(kind=c_double), public :: eps_grav ! gravitational softening
12
13  !*** Full particle type
14  type, public, bind(c) :: full_particle !$fdps FP,EPI,EPJ,Force
15    !$fdps copyFromForce full_particle (pot,pot) (acc,acc)
16    !$fdps copyFromFP full_particle (id,id) (mass,mass) (pos,pos)
17    !$fdps clear id=keep, mass=keep, pos=keep, vel=keep
18    integer(kind=c_long_long) :: id
19    real(kind=c_double) mass !$fdps charge
20    type(fdps_f64vec) :: pos !$fdps position
21    type(fdps_f64vec) :: vel !$fdps velocity
22    real(kind=c_double) :: pot
23    type(fdps_f64vec) :: acc
24  end type full_particle
25
26  !* The following types are used in PIKG-generated kernels
27  type, public, bind(c) :: epi_grav
28    type(fdps_f32vec) :: pos
29  end type epi_grav
30
31  type, public, bind(c) :: epj_grav
32    type(fdps_f32vec) :: pos
33    real(kind=c_float) :: mass
34  end type epj_grav
35
36  type, public, bind(c) :: force_grav
37    type(fdps_f32vec) :: acc
38    real(kind=c_float) :: pot
39  end type force_grav
40
41  contains
42
43  !*** Interaction function (particle-particle)
44 #if defined(ENABLE_PHANTOM_GRAPE_X86)
```

```

45 subroutine calc_gravity_ep_ep(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
46 #if defined(PARTICLE_SIMULATOR_THREAD_PARALLEL) && defined(_OPENMP)
47     use omp_lib
48 #endif
49     use phantom_grape_g5_x86
50     implicit none
51     integer(c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
52     type(full_particle), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
53     type(full_particle), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
54     type(full_particle), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
55     !* Local variables
56     integer(c_int) :: i,j
57     integer(c_int) :: npipe,npjpipe,devid
58     real(c_double), dimension(3,n_ip) :: xi,ai
59     real(c_double), dimension(n_ip) :: pi
60     real(c_double), dimension(3,n_jp) :: xj
61     real(c_double), dimension(n_jp) :: mj
62
63     npipe = n_ip
64     npjpipe = n_jp
65     do i=1,n_ip
66         xi(1,i) = ep_i(i)%pos%x
67         xi(2,i) = ep_i(i)%pos%y
68         xi(3,i) = ep_i(i)%pos%z
69         ai(1,i) = 0.0d0
70         ai(2,i) = 0.0d0
71         ai(3,i) = 0.0d0
72         pi(i) = 0.0d0
73     end do
74     do j=1,n_jp
75         xj(1,j) = ep_j(j)%pos%x
76         xj(2,j) = ep_j(j)%pos%y
77         xj(3,j) = ep_j(j)%pos%z
78         mj(j) = ep_j(j)%mass
79     end do
80 #if defined(PARTICLE_SIMULATOR_THREAD_PARALLEL) && defined(_OPENMP)
81     devid = omp_get_thread_num()
82     ! [IMPORTANT NOTE]
83     !   The subroutine calc_gravity_pp is called by a OpenMP thread
84     !   in the FDPS. This means that here is already in the parallel
85     !   region.
86     !   So, you can use omp_get_thread_num() without !$OMP parallel
87     !   directives.
88     !   If you use them, a nested parallel regions is made and the
89     !   gravity
90     !   calculation will not be performed correctly.
91 #else
92     devid = 0
93 #endif
94     call g5_set_xmjMC(devid, 0, n_jp, xj, mj)
95     call g5_set_nMC(devid, n_jp)
96     call g5_calculate_force_on_xMC(devid, xi, ai, pi, n_ip)
97     do i=1,n_ip
98         f(i)%acc%x = f(i)%acc%x + ai(1,i)
99         f(i)%acc%y = f(i)%acc%y + ai(2,i)

```

```

97         f(i)%acc%z = f(i)%acc%z + ai(3,i)
98         f(i)%pot   = f(i)%pot   - pi(i)
99     end do
100    end subroutine calc_gravity_ep_ep
101
102    subroutine calc_gravity_ep_sp(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
103 #if defined(PARTICLE_SIMULATOR_THREAD_PARALLEL) && defined(_OPENMP)
104     use omp_lib
105 #endif
106     use phantom_grape_g5_x86
107     implicit none
108     integer(c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
109     type(full_particle), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
110     type(fdps_spj_monopole), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
111     type(full_particle), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
112     !* Local variables
113     integer(c_int) :: i,j
114     integer(c_int) :: nipipe,npjpipe,devid
115     real(c_double), dimension(3,n_ip) :: xi,ai
116     real(c_double), dimension(n_ip) :: pi
117     real(c_double), dimension(3,n_jp) :: xj
118     real(c_double), dimension(n_jp) :: mj
119
120     nipipe = n_ip
121     npjpipe = n_jp
122     do i=1,n_ip
123         xi(1,i) = ep_i(i)%pos%x
124         xi(2,i) = ep_i(i)%pos%y
125         xi(3,i) = ep_i(i)%pos%z
126         ai(1,i) = 0.0d0
127         ai(2,i) = 0.0d0
128         ai(3,i) = 0.0d0
129         pi(i)   = 0.0d0
130     end do
131     do j=1,n_jp
132         xj(1,j) = ep_j(j)%pos%x
133         xj(2,j) = ep_j(j)%pos%y
134         xj(3,j) = ep_j(j)%pos%z
135         mj(j)   = ep_j(j)%mass
136     end do
137 #if defined(PARTICLE_SIMULATOR_THREAD_PARALLEL) && defined(_OPENMP)
138     devid = omp_get_thread_num()
139     ! [IMPORTANT NOTE]
140     !   The subroutine calc_gravity_psp is called by a OpenMP thread
141     !   in the FDPS. This means that here is already in the parallel
142     !   region.
143     !   So, you can use omp_get_thread_num() without !$OMP parallel
144     !   directives.
145     !   If you use them, a nested parallel regions is made and the
146     !   gravity
147     !   calculation will not be performed correctly.
148 #else
149     devid = 0
150 #endif
151     call g5_set_xmjMC(devid, 0, n_jp, xj, mj)

```

```

149      call g5_set_nMC(devid, n_jp)
150      call g5_calculate_force_on_xMC(devid, xi, ai, pi, n_ip)
151      do i=1,n_ip
152          f(i)%acc%x = f(i)%acc%x + ai(1,i)
153          f(i)%acc%y = f(i)%acc%y + ai(2,i)
154          f(i)%acc%z = f(i)%acc%z + ai(3,i)
155          f(i)%pot    = f(i)%pot    - pi(i)
156      end do
157  end subroutine calc_gravity_ep_sp
158 #elif defined(ENABLE_PIKG_KERNEL_X86)
159  subroutine calc_gravity_ep_ep(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
160      use, intrinsic :: iso_c_binding
161      use pikg_module_ep_ep
162      implicit none
163      integer(c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
164      type(full_particle), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
165      type(full_particle), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
166      type(full_particle), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
167      !* Local variables
168      integer(c_int) :: i,j
169      type(epi_grav), dimension(n_ip), target :: ep_i_tmp
170      type(epj_grav), dimension(n_jp), target :: ep_j_tmp
171      type(force_grav), dimension(n_ip), target :: f_tmp
172
173      if (n_ip > 0) then
174          do i=1,n_ip
175              ep_i_tmp(i)%pos%x = ep_i(i)%pos%x - ep_i(1)%pos%x
176              ep_i_tmp(i)%pos%y = ep_i(i)%pos%y - ep_i(1)%pos%y
177              ep_i_tmp(i)%pos%z = ep_i(i)%pos%z - ep_i(1)%pos%z
178              f_tmp(i)%acc%x = 0.0
179              f_tmp(i)%acc%y = 0.0
180              f_tmp(i)%acc%z = 0.0
181              f_tmp(i)%pot   = 0.0
182          end do
183          do j=1,n_jp
184              ep_j_tmp(j)%pos%x = ep_j(j)%pos%x - ep_i(1)%pos%x
185              ep_j_tmp(j)%pos%y = ep_j(j)%pos%y - ep_i(1)%pos%y
186              ep_j_tmp(j)%pos%z = ep_j(j)%pos%z - ep_i(1)%pos%z
187              ep_j_tmp(j)%mass = ep_j(j)%mass
188          end do
189          call pikg_calc_grav_ep_ep(c_loc(ep_i_tmp), n_ip, &
190                                c_loc(ep_j_tmp), n_jp, &
191                                c_loc(f_tmp))
192          do i=1,n_ip
193              f(i)%acc%x = f(i)%acc%x + f_tmp(i)%acc%x
194              f(i)%acc%y = f(i)%acc%y + f_tmp(i)%acc%y
195              f(i)%acc%z = f(i)%acc%z + f_tmp(i)%acc%z
196              f(i)%pot   = f(i)%pot   + f_tmp(i)%pot
197          end do
198      end if
199
200  end subroutine calc_gravity_ep_ep
201
202  subroutine calc_gravity_ep_sp(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
203      use, intrinsic :: iso_c_binding

```

```

204      use pikg_module_ep_ep
205      implicit none
206      integer(c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
207      type(full_particle), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
208      type(fdps_spj_monopole), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
209      type(full_particle), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
210      !* Local variables
211      integer(c_int) :: i,j
212      type(epi_grav), dimension(n_ip), target :: ep_i_tmp
213      type(epj_grav), dimension(n_jp), target :: ep_j_tmp
214      type(force_grav), dimension(n_ip), target :: f_tmp
215
216      if (n_ip > 0) then
217          do i=1,n_ip
218              ep_i_tmp(i)%pos%x = ep_i(i)%pos%x - ep_i(1)%pos%x
219              ep_i_tmp(i)%pos%y = ep_i(i)%pos%y - ep_i(1)%pos%y
220              ep_i_tmp(i)%pos%z = ep_i(i)%pos%z - ep_i(1)%pos%z
221              f_tmp(i)%acc%x = 0.0
222              f_tmp(i)%acc%y = 0.0
223              f_tmp(i)%acc%z = 0.0
224              f_tmp(i)%pot = 0.0
225          end do
226          do j=1,n_jp
227              ep_j_tmp(j)%pos%x = ep_j(j)%pos%x - ep_i(1)%pos%x
228              ep_j_tmp(j)%pos%y = ep_j(j)%pos%y - ep_i(1)%pos%y
229              ep_j_tmp(j)%pos%z = ep_j(j)%pos%z - ep_i(1)%pos%z
230              ep_j_tmp(j)%mass = ep_j(j)%mass
231          end do
232          call pikg_calc_grav_ep_ep(c_loc(ep_i_tmp), n_ip, &
233                               c_loc(ep_j_tmp), n_jp, &
234                               c_loc(f_tmp))
235          do i=1,n_ip
236              f(i)%acc%x = f(i)%acc%x + f_tmp(i)%acc%x
237              f(i)%acc%y = f(i)%acc%y + f_tmp(i)%acc%y
238              f(i)%acc%z = f(i)%acc%z + f_tmp(i)%acc%z
239              f(i)%pot = f(i)%pot + f_tmp(i)%pot
240          end do
241      end if
242
243      end subroutine calc_gravity_ep_sp
244 #else
245      subroutine calc_gravity_ep_ep(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
246      implicit none
247      integer(c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
248      type(full_particle), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
249      type(full_particle), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
250      type(full_particle), intent(inout) :: f
251      !* Local variables
252      integer(c_int) :: i,j
253      real(c_double) :: eps2,poti,r3_inv,r_inv
254      type(fdps_f64vec) :: xi,ai,rij
255
256      !* Compute force
257      eps2 = eps_grav * eps_grav
258      do i=1,n_ip

```

```

259      xi = ep_i(i)%pos
260      ai = 0.0d0
261      poti = 0.0d0
262      do j=1,n_jp
263          rij%x = xi%x - ep_j(j)%pos%x
264          rij%y = xi%y - ep_j(j)%pos%y
265          rij%z = xi%z - ep_j(j)%pos%z
266          r3_inv = rij%x*rij%x &
267              + rij%y*rij%y &
268              + rij%z*rij%z &
269              + eps2
270          r_inv = 1.0d0/sqrt(r3_inv)
271          r3_inv = r_inv * r_inv
272          r_inv = r_inv * ep_j(j)%mass
273          r3_inv = r3_inv * r_inv
274          ai%x = ai%x - r3_inv * rij%x
275          ai%y = ai%y - r3_inv * rij%y
276          ai%z = ai%z - r3_inv * rij%z
277          poti = poti - r_inv
278      ! [IMPORTANT NOTE]
279      !   In the innermost loop, we use the components of vectors
280      !   directly for vector operations because of the following
281      !   reasion. Except for intel compilers with '-ipo' option,
282      !   most of Fortran compilers use function calls to perform
283      !   vector operations like rij = x - ep_j(j)%pos.
284      !   This significantly slow downs the speed of the code.
285      !   By using the components of vector directly, we can avoid
286      !   these function calls.
287      end do
288      f(i)%pot = f(i)%pot + poti
289      f(i)%acc = f(i)%acc + ai
290  end do
291
292 end subroutine calc_gravity_ep_ep
293
294 !**** Interaction function (particle-super particle)
295 subroutine calc_gravity_ep_sp(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
296     implicit none
297     integer(c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
298     type(full_particle), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
299     type(fdps_spj_monopole), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
300     type(full_particle), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
301     !* Local variables
302     integer(c_int) :: i,j
303     real(c_double) :: eps2,poti,r3_inv,r_inv
304     type(fdps_f64vec) :: xi,ai,rij
305
306     eps2 = eps_grav * eps_grav
307     do i=1,n_ip
308         xi = ep_i(i)%pos
309         ai = 0.0d0
310         poti = 0.0d0
311         do j=1,n_jp
312             rij%x = xi%x - ep_j(j)%pos%x
313             rij%y = xi%y - ep_j(j)%pos%y

```

```

314         rij%z = xi%z - ep_j(j)%pos%z
315         r3_inv = rij%x*rij%x &
316             + rij%y*rij%y &
317             + rij%z*rij%z &
318             + eps2
319         r_inv = 1.0d0/sqrt(r3_inv)
320         r3_inv = r_inv * r_inv
321         r_inv = r_inv * ep_j(j)%mass
322         r3_inv = r3_inv * r_inv
323         ai%x = ai%x - r3_inv * rij%x
324         ai%y = ai%y - r3_inv * rij%y
325         ai%z = ai%z - r3_inv * rij%z
326         poti = poti - r_inv
327     end do
328     f(i)%pot = f(i)%pot + poti
329     f(i)%acc = f(i)%acc + ai
330 end do
331
332 end subroutine calc_gravity_ep_sp
333 #endif
334
335 end module user_defined_types

```

Listing 34: *N*体シミュレーションのサンプルコード (*f_main.F90*)

```

1 !-----
2 !//////////////////////////////////////////////////////////////////////// < M A I N   R O U T I N E > /////////////////
3 !-----
4 subroutine f_main()
5   use fdps_module
6 #if defined(ENABLE_PHANTOM_GRAPE_X86)
7   use phantom_grape_g5_x86
8 #endif
9 #if defined(ENABLE_PIKG_KERNEL_X86)
10  use pikg_module_ep_ep
11 #endif
12  use user_defined_types
13  implicit none
14  !* Local parameters
15  integer, parameter :: n_tot=2**10
16  !-(force parameters)
17  real, parameter :: theta = 0.5
18  integer, parameter :: n_leaf_limit = 8
19  integer, parameter :: n_group_limit = 64
20  !-(domain decomposition)
21  real, parameter :: coef_ema=0.3
22  !-(timing parameters)
23  double precision, parameter :: time_end = 10.0d0
24  double precision, parameter :: dt = 1.0d0/128.0d0
25  double precision, parameter :: dt_diag = 1.0d0/8.0d0
26  double precision, parameter :: dt_snap = 1.0d0
27  !* Local variables
28  integer :: i,j,k,num_loop,ierr
29  integer :: psys_num,dinfo_num,tree_num
30  integer :: n_loc
31  logical :: clear

```

```

32  double precision :: ekin0,epot0,etot0
33  double precision :: ekin1,epot1,etot1
34  double precision :: time_diag,time_snap,time_sys
35  double precision :: r,acc
36  real(c_float) :: eps2
37  type(fdps_controller) :: fdps_ctrl
38  type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
39  type(c_funptr) :: pfunc_ep_ep,pfunc_ep_sp
40  !-(IO)
41  character(len=64) :: fname
42  integer(c_int) :: np
43
44  /* Initialize FDPS
45  call fdps_ctrl%PS_Initialize()
46
47  /* Create domain info object
48  call fdps_ctrl%create_dinfo(dinfo_num)
49  call fdps_ctrl%init_dinfo(dinfo_num,coef_ema)
50
51  /* Create particle system object
52  call fdps_ctrl%create_psyst(psys_num,'full_particle')
53  call fdps_ctrl%init_psyst(psys_num)
54
55  /* Make an initial condition
56  call setup_IC(fdps_ctrl,psys_num,n_tot)
57
58  /* Domain decomposition and exchange particle
59  call fdps_ctrl%decompose_domain_all(dinfo_num,psys_num)
60  call fdps_ctrl%exchange_particle(psys_num,dinfo_num)
61  n_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num)
62
63  /* Create tree object
64  call fdps_ctrl%create_tree(tree_num, &
65          "Long,full_particle,full_particle,
66          full_particle,Monopole")
67  call fdps_ctrl%init_tree(tree_num,n_loc,theta, &
68          n_leaf_limit,n_group_limit)
69 #if defined(ENABLE_PHANTOM_GRAPE_X86)
70   call g5_open()
71   call g5_set_eps_to_all(eps_grav);
72 #elif defined(ENABLE_PIKG_KERNEL_X86)
73   eps2 = eps_grav * eps_grav
74   call pikg_calc_grav_ep_ep_initialize(eps2)
75 #endif
76
77  /* Compute force at the initial time
78  pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_gravity_ep_ep)
79  pfunc_ep_sp = c_funloc(calc_gravity_ep_sp)
80  call fdps_ctrl%calc_force_all_and_write_back(tree_num,      &
81                                              pfunc_ep_ep, &
82                                              pfunc_ep_sp, &
83                                              psys_num,      &
84                                              dinfo_num)
85  /* Compute energies at the initial time

```

```

86  clear = .true.
87  call calc_energy(fdps_ctrl,psys_num,etot0,ekin0,epot0,clear)
88
89  /* Time integration
90  time_diag = 0.0d0
91  time_snap = 0.0d0
92  time_sys = 0.0d0
93  num_loop = 0
94  do
95      /* Output
96      !if (fdps_ctrl%get_rank() == 0) then
97          write(*,50)num_loop,time_sys
98          50 format('(num_loop, time_sys) = ',i5,1x,1e25.16e3)
99      !end if
100     if ( (time_sys >= time_snap) .or. &
101         (((time_sys + dt) - time_snap) > (time_snap - time_sys)) ) then
102         call output(fdps_ctrl,psys_num)
103         time_snap = time_snap + dt_snap
104     end if
105
106     /* Compute energies and output the results
107     clear = .true.
108     call calc_energy(fdps_ctrl,psys_num,etot1,ekin1,epot1,clear)
109     if (fdps_ctrl%get_rank() == 0) then
110         if ( (time_sys >= time_diag) .or. &
111             (((time_sys + dt) - time_diag) > (time_diag - time_sys)) )
112             then
113                 write(*,100)time_sys,(etot1-etot0)/etot0
114                 100 format("time: ",1e20.10e3,"energy,error: ",1e20.10e3)
115                 time_diag = time_diag + dt_diag
116             end if
117     end if
118
119     /* Leapfrog: Kick-Drift
120     call kick(fdps_ctrl,psys_num,0.5d0*dt)
121     time_sys = time_sys + dt
122     call drift(fdps_ctrl,psys_num,dt)
123
124     /* Domain decomposition & exchange particle
125     if (mod(num_loop,4) == 0) then
126         call fdps_ctrl%decompose_domain_all(dinfo_num,psys_num)
127     end if
128     call fdps_ctrl%exchange_particle(psys_num,dinfo_num)
129
130     /* Force calculation
131     pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_gravity_ep_ep)
132     pfunc_ep_sp = c_funloc(calc_gravity_ep_sp)
133     call fdps_ctrl%calc_force_all_and_write_back(tree_num,      &
134                                               pfunc_ep_ep,      &
135                                               pfunc_ep_sp,      &
136                                               psys_num,        &
137                                               dinfo_num)
138
139     /* Leapfrog: Kick
140     call kick(fdps_ctrl,psys_num,0.5d0*dt)

```

```

140      !* Update num_loop
141      num_loop = num_loop + 1
142
143      !* Termination
144      if (time_sys >= time_end) then
145          exit
146      end if
147  end do
148
149 #if defined(ENABLE_PHANTOM_GRAPE_X86)
150     call g5_close()
151 #endif
152
153      !* Finalize FDPS
154      call fdps_ctrl%PS_Finalize()
155
156 end subroutine f_main
157
158 !-----
159 !//////////////////////////////////////////////////////////////////////// S U B R O U T I N E ///////////////////////////////
160 !//////////////////////////////////////////////////////////////////////// < S E T U P _ I C > ///////////////////////////////
161 !-----
162 subroutine setup_IC(fdps_ctrl,psys_num,nptcl_glb)
163     use fdps_vector
164     use fdps_module
165     use user_defined_types
166     implicit none
167     type(fdps_controller), intent(IN) :: fdps_ctrl
168     integer, intent(IN) :: psys_num,nptcl_glb
169     !* Local parameters
170     double precision, parameter :: m_tot=1.0d0
171     double precision, parameter :: rmax=3.0d0,r2max=rmax*rmax
172     !* Local variables
173     integer :: i,j,k,ierr
174     integer :: nprocs,myrank
175     double precision :: r2,cm_mass
176     type(fdps_f64vec) :: cm_pos,cm_vel,pos
177     type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
178     character(len=64) :: fname
179
180     !* Get # of MPI processes and rank number
181     nprocs = fdps_ctrl%get_num_procs()
182     myrank = fdps_ctrl%get_rank()
183
184     !* Make an initial condition at RANK 0
185     if (myrank == 0) then
186         !* Set # of local particles
187         call fdps_ctrl%set_nptcl_loc(psys_num,nptcl_glb)
188
189         !* Create an uniform sphere of particles
190         !!! get the pointer to full particle data
191         call fdps_ctrl%get_psys_fptra(psys_num,ptcl)
192         !!! initialize Mersenne twister
193         call fdps_ctrl%MT_init_genrand(0)
194         do i=1,nptcl_glb

```

```

195      ptcl(i)%id    = i
196      ptcl(i)%mass = m_tot/nptcl_glb
197      do
198          ptcl(i)%pos%x = (2.0d0*fdps_ctrl%MT_genrand_res53()-1.0d0) *
199              rmax
200          ptcl(i)%pos%y = (2.0d0*fdps_ctrl%MT_genrand_res53()-1.0d0) *
201              rmax
202          ptcl(i)%pos%z = (2.0d0*fdps_ctrl%MT_genrand_res53()-1.0d0) *
203              rmax
204          r2 = ptcl(i)%pos*ptcl(i)%pos
205          if ( r2 < r2max ) exit
206      end do
207      ptcl(i)%vel = 0.0d0
208  end do
209
210      !* Correction
211      cm_pos = 0.0d0
212      cm_vel = 0.0d0
213      cm_mass = 0.0d0
214      do i=1,nptcl_glb
215          cm_pos = cm_pos + ptcl(i)%mass * ptcl(i)%pos
216          cm_vel = cm_vel + ptcl(i)%mass * ptcl(i)%vel
217          cm_mass = cm_mass + ptcl(i)%mass
218      end do
219      cm_pos = cm_pos/cm_mass
220      cm_vel = cm_vel/cm_mass
221      do i=1,nptcl_glb
222          ptcl(i)%pos = ptcl(i)%pos - cm_pos
223          ptcl(i)%vel = ptcl(i)%vel - cm_vel
224      end do
225
226      !* Output
227      !fname = 'initial.dat'
228      !open(unit=9,file=trim(fname),action='write',status='replace', &
229      !      form='unformatted',access='stream')
230      !open(unit=9,file=trim(fname),action='write',status='replace')
231      !      do i=1,nptcl_glb
232          !write(9)ptcl(i)%pos%x,ptcl(i)%pos%y,ptcl(i)%pos%z
233          !      write(9,'(3es25.16e3)')ptcl(i)%pos%x,ptcl(i)%pos%y,ptcl(i)%pos
234          !      %z
235      !      end do
236      !close(unit=9)
237
238      !* Release the pointer
239      nullify( ptcl )
240
241      else
242          call fdps_ctrl%set_nptcl_loc(psyst_num,0)
243      end if
244
245      !* Set the gravitational softening
246      eps_grav = 1.0d0/32.0d0
247
248  end subroutine setup_IC

```

```

246 !-----  

247 !// S U B R O U T I N E ///////////////////////////////////////////////////////////////////  

248 !// < K I C K > ///////////////////////////////////////////////////////////////////  

249 !-----  

250 subroutine kick(fdps_ctrl,psys_num,dt)  

251   use fdps_vector  

252   use fdps_module  

253   use user_defined_types  

254   implicit none  

255   type(fdps_controller), intent(IN) :: fdps_ctrl  

256   integer, intent(IN) :: psys_num  

257   double precision, intent(IN) :: dt  

258   /* Local variables  

259   integer :: i,nptcl_loc  

260   type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl  

261  

262   /* Get # of local particles  

263   nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num)  

264  

265   /* Get the pointer to full particle data  

266   call fdps_ctrl%get_psyst_fptr(psys_num,ptcl)  

267   do i=1,nptcl_loc  

268     ptcl(i)%vel = ptcl(i)%vel + ptcl(i)%acc * dt  

269   end do  

270   nullify(ptcl)  

271  

272 end subroutine kick  

273  

274 !-----  

275 !// S U B R O U T I N E ///////////////////////////////////////////////////////////////////  

276 !// < D R I F T > ///////////////////////////////////////////////////////////////////  

277 !-----  

278 subroutine drift(fdps_ctrl,psys_num,dt)  

279   use fdps_vector  

280   use fdps_module  

281   use user_defined_types  

282   implicit none  

283   type(fdps_controller), intent(IN) :: fdps_ctrl  

284   integer, intent(IN) :: psys_num  

285   double precision, intent(IN) :: dt  

286   /* Local variables  

287   integer :: i,nptcl_loc  

288   type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl  

289  

290   /* Get # of local particles  

291   nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num)  

292  

293   /* Get the pointer to full particle data  

294   call fdps_ctrl%get_psyst_fptr(psys_num,ptcl)  

295   do i=1,nptcl_loc  

296     ptcl(i)%pos = ptcl(i)%pos + ptcl(i)%vel * dt  

297   end do  

298   nullify(ptcl)  

299  

300 end subroutine drift

```

```

301
302 !-----+
303 !//////////////////////////////////////////////////////////////////////// S U B R O U T I N E ///////////////
304 !//////////////////////////////////////////////////////////////////////// < C A L C _ E N E R G Y > ///////////////
305 !-----+
306 subroutine calc_energy(fdps_ctrl,psys_num,etot,ekin,epot,clear)
307   use fdps_vector
308   use fdps_module
309   use user_defined_types
310   implicit none
311   type(fdps_controller), intent(IN) :: fdps_ctrl
312   integer, intent(IN) :: psys_num
313   double precision, intent(INOUT) :: etot, ekin, epot
314   logical, intent(IN) :: clear
315   !* Local variables
316   integer :: i,nptcl_loc
317   double precision :: etot_loc, ekin_loc, epot_loc
318   type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
319
320   !* Clear energies
321   if (clear .eqv. .true.) then
322     etot = 0.0d0
323     ekin = 0.0d0
324     epot = 0.0d0
325   end if
326
327   !* Get # of local particles
328   nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num)
329   call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num,ptcl)
330
331   !* Compute energies
332   ekin_loc = 0.0d0
333   epot_loc = 0.0d0
334   do i=1,nptcl_loc
335     ekin_loc = ekin_loc + ptcl(i)%mass * ptcl(i)%vel * ptcl(i)%vel
336     epot_loc = epot_loc + ptcl(i)%mass * (ptcl(i)%pot + ptcl(i)%mass/
337       eps_grav)
338   end do
339   ekin_loc = ekin_loc * 0.5d0
340   epot_loc = epot_loc * 0.5d0
341   etot_loc = ekin_loc + epot_loc
342   call fdps_ctrl%get_sum(ekin_loc,ekin)
343   call fdps_ctrl%get_sum(epot_loc,epot)
344   call fdps_ctrl%get_sum(etot_loc,etot)
345
346   !* Release the pointer
347   nullify(ptcl)
348 end subroutine calc_energy
349
350 !-----+
351 !//////////////////////////////////////////////////////////////////////// S U B R O U T I N E ///////////////
352 !//////////////////////////////////////////////////////////////////////// < O U T P U T > ///////////////
353 !-----+
354 subroutine output(fdps_ctrl,psys_num)

```

```

355  use fdps_vector
356  use fdps_module
357  use user_defined_types
358  implicit none
359  type(fdps_controller), intent(IN) :: fdps_ctrl
360  integer, intent(IN) :: psys_num
361  !* Local parameters
362  character(len=16), parameter :: root_dir="result"
363  character(len=16), parameter :: file_prefix_1st="snap"
364  character(len=16), parameter :: file_prefix_2nd="proc"
365  !* Local variables
366  integer :: i,nptcl_loc
367  integer :: myrank
368  character(len=5) :: file_num,proc_num
369  character(len=64) :: cmd,sub_dir, fname
370  type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
371  !* Static variables
372  integer, save :: snap_num=0
373
374  !* Get the rank number
375  myrank = fdps_ctrl%get_rank()
376
377  !* Get # of local particles
378  nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num)
379
380  !* Get the pointer to full particle data
381  call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num,ptcl)
382
383  !* Output
384  write(file_num,"(i5.5)")snap_num
385  write(proc_num,"(i5.5)")myrank
386  fname = trim(root_dir) // "/" &
387    // trim(file_prefix_1st) // file_num // "-" &
388    // trim(file_prefix_2nd) // proc_num // ".dat"
389  open(unit=9,file=trim(fname),action='write',status='replace')
390    do i=1,nptcl_loc
391      write(9,100)ptcl(i)%id,ptcl(i)%mass, &
392                  ptcl(i)%pos%x,ptcl(i)%pos%y,ptcl(i)%pos%z, &
393                  ptcl(i)%vel%x,ptcl(i)%vel%y,ptcl(i)%vel%z
394      100 format(i8,1x,7e25.16e3)
395    end do
396  close(unit=9)
397  nullify(ptcl)
398
399  !* Update snap_num
400  snap_num = snap_num + 1
401
402 end subroutine output

```

5.2 固定長SPHシミュレーション

固定長SPHシミュレーションのサンプルコードを以下に示す。このサンプルは第3, 4節で用いた固定長SPHシミュレーションのサンプルコードと同じものである。これをカット&

ペーストしてコンパイルすれば、正常に動作する固定長 SPH シミュレーションコードを作ることができる。

Listing 35: 固定長 SPH シミュレーションのサンプルコード (user_defined.F90)

```

1 !=====
2 !   MODULE: User defined types
3 !=====
4 module user_defined_types
5   use, intrinsic :: iso_c_binding
6   use fdps_vector
7   implicit none
8
9   !* Private parameters
10  real(kind=c_double), parameter, private :: pi=datan(1.0d0)*4.0d0
11  !* Public parameters
12  real(kind=c_double), parameter, public :: kernel_support_radius=2.5d0
13
14  !**** Force types
15  type, public, bind(c) :: force_dens !$fdps Force
16    !$fdps clear smth=keep
17    real(kind=c_double) :: dens
18    real(kind=c_double) :: smth
19 end type force_dens
20
21 type, public, bind(c) :: force_hydro !$fdps Force
22   !$fdps clear
23   type(fdps_f64vec) :: acc
24     real(kind=c_double) :: eng_dot
25     real(kind=c_double) :: dt
26 end type force_hydro
27
28 !**** Full particle type
29 type, public, bind(c) :: full_particle !$fdps FP
30   !$fdps copyFromForce force_dens (dens,dens)
31   !$fdps copyFromForce force_hydro (acc,acc) (eng_dot,eng_dot) (dt,dt)
32   real(kind=c_double) :: mass !$fdps charge
33   type(fdps_f64vec) :: pos !$fdps position
34   type(fdps_f64vec) :: vel
35   type(fdps_f64vec) :: acc
36   real(kind=c_double) :: dens
37   real(kind=c_double) :: eng
38   real(kind=c_double) :: pres
39   real(kind=c_double) :: smth !$fdps rsearch
40   real(kind=c_double) :: snds
41   real(kind=c_double) :: eng_dot
42   real(kind=c_double) :: dt
43   integer(kind=c_long_long) :: id
44   type(fdps_f64vec) :: vel_half
45     real(kind=c_double) :: eng_half
46 end type full_particle
47
48 !**** Essential particle type
49 type, public, bind(c) :: essential_particle !$fdps EPI,EPJ
50   !$fdps copyFromFP full_particle (id,id) (pos,pos) (vel,vel) (mass,
      mass) (smth,smth) (dens,dens) (pres,pres) (snds,snds)

```

```

51      integer(kind=c_long_long) :: id !$fdps id
52      type(fdps_f64vec) :: pos !$fdps position
53      type(fdps_f64vec) :: vel
54      real(kind=c_double) :: mass !$fdps charge
55      real(kind=c_double) :: smth !$fdps rsearch
56      real(kind=c_double) :: dens
57      real(kind=c_double) :: pres
58      real(kind=c_double) :: snds
59  end type essential_particle
60
61  !* Public routines
62  public :: W
63  public :: gradW
64  public :: calc_density
65  public :: calc_hydro_force
66
67  contains
68
69  !-----
70  pure function W(dr,h)
71    implicit none
72    real(kind=c_double) :: W
73    type(fdps_f64vec), intent(in) :: dr
74    real(kind=c_double), intent(in) :: h
75    !* Local variables
76    real(kind=c_double) :: s,s1,s2
77
78    s = dsqrt(dr%x*dr%x &
79              +dr%y*dr%y &
80              +dr%z*dr%z)/h
81    s1 = 1.0d0 - s
82    if (s1 < 0.0d0) s1 = 0.0d0
83    s2 = 0.5d0 - s
84    if (s2 < 0.0d0) s2 = 0.0d0
85    W = (s1*s1*s1) - 4.0d0*(s2*s2*s2)
86    W = W * 16.0d0/(pi*h*h*h)
87
88  end function W
89
90  !-----
91  pure function gradW(dr,h)
92    implicit none
93    type(fdps_f64vec) :: gradW
94    type(fdps_f64vec), intent(in) :: dr
95    real(kind=c_double), intent(in) :: h
96    !* Local variables
97    real(kind=c_double) :: dr_abs,s,s1,s2,coef
98
99    dr_abs = dsqrt(dr%x*dr%x &
100                  +dr%y*dr%y &
101                  +dr%z*dr%z)
102    s = dr_abs/h
103    s1 = 1.0d0 - s
104    if (s1 < 0.0d0) s1 = 0.0d0
105    s2 = 0.5d0 - s

```

```

106      if (s2 < 0.0d0) s2 = 0.0d0
107      coef = - 3.0d0*(s1*s1) + 12.0d0*(s2*s2)
108      coef = coef * 16.0d0/(pi*h*h*h)
109      coef = coef / (dr_abs*h + 1.0d-6*h)
110      gradW%x = dr%x * coef
111      gradW%y = dr%y * coef
112      gradW%z = dr%z * coef
113
114  end function gradW
115
116 !**** Interaction function
117 subroutine calc_density(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
118     integer(kind=c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
119     type(essential_particle), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
120     type(essential_particle), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
121     type(force_dens), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
122     !* Local variables
123     integer(kind=c_int) :: i,j
124     type(fdps_f64vec) :: dr
125
126     do i=1,n_ip
127         f(i)%dens = 0.0d0
128         do j=1,n_jp
129             dr%x = ep_j(j)%pos%x - ep_i(i)%pos%x
130             dr%y = ep_j(j)%pos%y - ep_i(i)%pos%y
131             dr%z = ep_j(j)%pos%z - ep_i(i)%pos%z
132             f(i)%dens = f(i)%dens &
133                     + ep_j(j)%mass * W(dr,ep_i(i)%smth)
134         end do
135     end do
136
137 end subroutine calc_density
138
139 !**** Interaction function
140 subroutine calc_hydro_force(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
141     integer(kind=c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
142     type(essential_particle), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
143     type(essential_particle), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
144     type(force_hydro), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
145     !* Local parameters
146     real(kind=c_double), parameter :: C_CFL=0.3d0
147     !* Local variables
148     integer(kind=c_int) :: i,j
149     real(kind=c_double) :: mass_i,mass_j,smth_i,smth_j, &
150                           dens_i,dens_j,pres_i,pres_j, &
151                           snds_i,snds_j
152     real(kind=c_double) :: povrho2_i,povrho2_j, &
153                           v_sig_max,dr_dv,w_ij,v_sig,AV
154     type(fdps_f64vec) :: pos_i,pos_j,vel_i,vel_j, &
155                           dr,dv,gradW_ij
156
157     do i=1,n_ip
158         !* Zero-clear
159         v_sig_max = 0.0d0
160         !* Extract i-particle info.

```

```

161      pos_i = ep_i(i)%pos
162      vel_i = ep_i(i)%vel
163      mass_i = ep_i(i)%mass
164      smth_i = ep_i(i)%smth
165      dens_i = ep_i(i)%dens
166      pres_i = ep_i(i)%pres
167      snds_i = ep_i(i)%snds
168      povrho2_i = pres_i/(dens_i*dens_i)
169      do j=1,n_jp
170          !* Extract j-particle info.
171          pos_j%x = ep_j(j)%pos%x
172          pos_j%y = ep_j(j)%pos%y
173          pos_j%z = ep_j(j)%pos%z
174          vel_j%x = ep_j(j)%vel%x
175          vel_j%y = ep_j(j)%vel%y
176          vel_j%z = ep_j(j)%vel%z
177          mass_j = ep_j(j)%mass
178          smth_j = ep_j(j)%smth
179          dens_j = ep_j(j)%dens
180          pres_j = ep_j(j)%pres
181          snds_j = ep_j(j)%snds
182          povrho2_j = pres_j/(dens_j*dens_j)
183          !* Compute dr & dv
184          dr%x = pos_i%x - pos_j%x
185          dr%y = pos_i%y - pos_j%y
186          dr%z = pos_i%z - pos_j%z
187          dv%x = vel_i%x - vel_j%x
188          dv%y = vel_i%y - vel_j%y
189          dv%z = vel_i%z - vel_j%z
190          !* Compute the signal velocity
191          dr_dv = dr%x * dv%x + dr%y * dv%y + dr%z * dv%z
192          if (dr_dv < 0.0d0) then
193              w_ij = dr_dv / sqrt(dr%x * dr%x + dr%y * dr%y + dr%z * dr%z
194                  )
195          else
196              w_ij = 0.0d0
197          end if
198          v_sig = snds_i + snds_j - 3.0d0 * w_ij
199          v_sig_max = max(v_sig_max, v_sig)
200          !* Compute the artificial viscosity
201          AV = - 0.5d0*v_sig*w_ij / (0.5d0*(dens_i+dens_j))
202          !* Compute the average of the gradients of kernel
203          gradW_ij = 0.5d0 * (gradW(dr,smth_i) + gradW(dr,smth_j))
204          !* Compute the acceleration and the heating rate
205          f(i)%acc%x = f(i)%acc%x - mass_j*(povrho2_i+povrho2_j+AV)*
206              gradW_ij%x
207          f(i)%acc%y = f(i)%acc%y - mass_j*(povrho2_i+povrho2_j+AV)*
208              gradW_ij%y
209          f(i)%acc%z = f(i)%acc%z - mass_j*(povrho2_i+povrho2_j+AV)*
210              gradW_ij%z
211          f(i)%eng_dot = f(i)%eng_dot &
212              + mass_j * (povrho2_i + 0.5d0*AV) &
213                  *(dv%x * gradW_ij%x &
214                      +dv%y * gradW_ij%y &
215                          +dv%z * gradW_ij%z)

```

```

212      end do
213      f(i)%dt = C_CFL*2.0d0*smth_i/(v_sig_max*kernel_support_radius)
214  end do
215  ! [IMPORTANT NOTE]
216  !   In the innermost loop, we use the components of vectors
217  !   directly for vector operations because of the following
218  !   reason. Except for intel compilers with '-ipo' option,
219  !   most of Fortran compilers use function calls to perform
220  !   vector operations like rij = x - ep_j(j)%pos.
221  !   This significantly slow downs the speed of the code.
222  !   By using the components of vector directly, we can avoid
223  !   these function calls.
224
225  end subroutine calc_hydro_force
226
227 end module user_defined_types

```

Listing 36: 固定長 SPH シミュレーションのサンプルコード (f_main.F90)

```

1 !-----  

2 !//////////////////////////////////////////////////////////////////////// < M A I N     R O U T I N E > ///////////////////  

3 !-----  

4 subroutine f_main()  

5   use fdps_vector  

6   use fdps_module  

7   use user_defined_types  

8   implicit none  

9   !* Local parameters  

10  !-(force parameters)  

11  real, parameter :: theta = 0.5  

12  integer, parameter :: n_leaf_limit = 8  

13  integer, parameter :: n_group_limit = 64  

14  !-(domain decomposition)  

15  real, parameter :: coef_ema=0.3  

16  !-(IO)  

17  integer, parameter :: output_interval=10  

18  !* Local variables  

19  integer :: i,j,k,ierr  

20  integer :: nstep  

21  integer :: psys_num,dinfo_num  

22  integer :: tree_num_dens,tree_num_hydro  

23  integer :: n_tot,n_loc  

24  logical :: clear  

25  double precision :: time,dt,end_time  

26  type(fdps_f64vec) :: pos_ll,pos_ul  

27  type(fdps_controller) :: fdps_ctrl  

28  type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl  

29  type(c_funptr) :: pfunc_ep_ep  

30  !-(IO)  

31  character(len=64) :: filename  

32  !* External routines  

33  double precision, external :: get_timestep  

34
35  !* Initialize FDPS
36  call fdps_ctrl%PS_Initialize()
37

```

```

38  !* Make an instance of ParticleSystem and initialize it
39  call fdps_ctrl%create_psyst(psys_num,'full_particle')
40  call fdps_ctrl%init_psyst(psys_num)
41
42  !* Make an initial condition and initialize the particle system
43  call setup_IC(fdps_ctrl,psys_num,end_time, pos_ll, pos_ul)
44
45  !* Make an instance of DomainInfo and initialize it
46  call fdps_ctrl%create_dinfo(dinfo_num)
47  call fdps_ctrl%init_dinfo(dinfo_num,coef_ema)
48  call fdps_ctrl%set_boundary_condition(dinfo_num,fdps_bc_periodic_xyz)
49  call fdps_ctrl%set_pos_root_domain(dinfo_num, pos_ll, pos_ul)
50
51  !* Perform domain decomposition and exchange particles
52  call fdps_ctrl%decompose_domain_all(dinfo_num,psys_num)
53  call fdps_ctrl%exchange_particle(psys_num,dinfo_num)
54
55  !* Make two tree structures
56  n_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num)
57  !** dens_tree (used for the density calculation)
58  call fdps_ctrl%create_tree(tree_num_dens, &
59          "Short,force_dens,essential_particle,
60          essential_particle,Gather")
61  call fdps_ctrl%init_tree(tree_num_dens,n_loc,theta, &
62          n_leaf_limit,n_group_limit)
63
64  !** hydro_tree (used for the force calculation)
65  call fdps_ctrl%create_tree(tree_num_hydro, &
66          "Short,force_hydro,essential_particle,
67          essential_particle,Symmetry")
68  call fdps_ctrl%init_tree(tree_num_hydro,n_loc,theta, &
69          n_leaf_limit,n_group_limit)
70
71  !* Compute density, pressure, acceleration due to pressure gradient
72  pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_density)
73  call fdps_ctrl%calc_force_all_and_write_back(tree_num_dens, &
74          pfunc_ep_ep,      &
75          psys_num,        &
76          dinfo_num)
77  call set_pressure(fdps_ctrl,psys_num)
78  pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_hydro_force)
79  call fdps_ctrl%calc_force_all_and_write_back(tree_num_hydro, &
80          pfunc_ep_ep,      &
81          psys_num,        &
82          dinfo_num)
83
84  !* Get timestep
85  dt = get_timestep(fdps_ctrl,psys_num)
86
87  !* Main loop for time integration
88  nstep = 0; time = 0.0d0
89  do
90      !* Leap frog: Initial Kick & Full Drift
91      call initial_kick(fdps_ctrl,psys_num,dt)
92      call full_drift(fdps_ctrl,psys_num,dt)

```

```

91      !* Adjust the positions of the SPH particles that run over
92      ! the computational boundaries.
93      call fdps_ctrl%adjust_pos_into_root_domain(psys_num,dinfo_num)
94
95      !* Leap frog: Predict
96      call predict(fdps_ctrl,psys_num,dt)
97
98      !* Perform domain decomposition and exchange particles again
99      call fdps_ctrl%decompose_domain_all(dinfo_num,psys_num)
100     call fdps_ctrl%exchange_particle(psys_num,dinfo_num)
101
102     !* Compute density, pressure, acceleration due to pressure gradient
103     pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_density)
104     call fdps_ctrl%calc_force_all_and_write_back(tree_num_dens, &
105                                         pfunc_ep_ep, &
106                                         psys_num, &
107                                         dinfo_num)
108     call set_pressure(fdps_ctrl,psys_num)
109     pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_hydro_force)
110     call fdps_ctrl%calc_force_all_and_write_back(tree_num_hydro, &
111                                         pfunc_ep_ep, &
112                                         psys_num, &
113                                         dinfo_num)
114
115     !* Get a new timestep
116     dt = get_timestep(fdps_ctrl,psys_num)
117
118     !* Leap frog: Final Kick
119     call final_kick(fdps_ctrl,psys_num,dt)
120
121     !* Output result files
122     if (mod(nstep,output_interval) == 0) then
123         call output(fdps_ctrl,psys_num,nstep)
124         call check_cnsrvd_vars(fdps_ctrl,psys_num)
125     end if
126
127     !* Output information to STDOUT
128     if (fdps_ctrl%get_rank() == 0) then
129         write(*,200)time,nstep
130         200 format("=====/&
131                     "time\uu=\u",1es25.16e3/&
132                     "nstep\u=\u",i6/&
133                     "=====")
```

end if

135
136 !* Termination condition
137 if (time >= end_time) exit
138
139 !* Update time & step
140 time = time + dt
141 nstep = nstep + 1
142
143 end do
144 call fdps_ctrl%ps_finalize()
145 stop 0

```

146
147     !* Finalize FDPS
148     call fdps_ctrl%PS_Finalize()
149
150 end subroutine f_main
151
152 !-----
153 !//////////////////////////////////////////////////////////////////////// S U B R O U T I N E ///////////////////////////////
154 !//////////////////////////////////////////////////////////////////////// < S E T U P _ I C > ///////////////////////////////
155 !-----
156 subroutine setup_IC(fdps_ctrl,psys_num,end_time,pos_ll,pos_ul)
157     use fdps_vector
158     use fdps_module
159     use user_defined_types
160     implicit none
161     type(fdps_controller), intent(IN) :: fdps_ctrl
162     integer, intent(IN) :: psys_num
163     double precision, intent(inout) :: end_time
164     type(fdps_f64vec) :: pos_ll,pos_ul
165     !* Local variables
166     integer :: i,ii,irank
167     integer :: nprocs, myrank
168     integer :: nx_left, ny_left, nz_left
169     integer :: nx_right, ny_right, nz_right
170     integer :: nptcl_loc, nptcl_glb
171     integer :: nptcl_quot, nptcl_rem
172     integer :: i_first, i_last
173     double precision :: dens_left, dens_right
174     double precision :: eng_left, eng_right
175     double precision :: sv, mass
176     double precision :: x,y,z,dx,dy,dz
177     type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
178     character(len=5) :: proc_num
179     character(len=64) :: fname
180
181     !* Get # of MPI processes and rank number
182     nprocs = fdps_ctrl%get_num_procs()
183     myrank = fdps_ctrl%get_rank()
184
185     !* Set the box size
186     pos_ll%x = 0.0d0
187     pos_ll%y = 0.0d0
188     pos_ll%z = 0.0d0
189     pos_ul%x = 1.0d0
190     pos_ul%y = pos_ul%x / 8.0d0
191     pos_ul%z = pos_ul%x / 8.0d0
192
193     !* Set the left and right states
194     dens_left = 1.0d0
195     eng_left = 2.5d0
196     dens_right = 0.5d0
197     eng_right = 2.5d0
198
199     !* Set the separation of particle of the left state
200     dx = 1.0d0 / 128.0d0

```

```

201      dy = dx
202      dz = dx
203
204      /* Count # of particles in the computational domain
205      ** (1) Left-half
206      nx_left = 0
207      x = 0.0d0
208      do
209          nx_left = nx_left + 1
210          x = x + dx
211          if (x >= 0.5d0*pos_ul%x) exit
212      end do
213      ny_left = 0
214      y = 0.0d0
215      do
216          ny_left = ny_left + 1
217          y = y + dy
218          if (y >= pos_ul%y) exit
219      end do
220      nz_left = 0
221      z = 0.0d0
222      do
223          nz_left = nz_left + 1
224          z = z + dz
225          if (z >= pos_ul%z) exit
226      end do
227      ** (2) Right-half
228      nx_right = 0
229      x = 0.5d0*pos_ul%x
230      do
231          nx_right = nx_right + 1
232          x = x + (dens_left/dens_right)*dx
233          if (x >= pos_ul%x) exit
234      end do
235      ny_right = 0
236      y = 0.0d0
237      do
238          ny_right = ny_right + 1
239          y = y + dy
240          if (y >= pos_ul%y) exit
241      end do
242      nz_right = 0
243      z = 0.0d0
244      do
245          nz_right = nz_right + 1
246          z = z + dz
247          if (z >= pos_ul%z) exit
248      end do
249      ** (3) calculate # of particles
250      nptcl_glb = (nx_left * ny_left * nz_left) &
251                  + (nx_right * ny_right * nz_right)
252      if (myrank == 0) then
253          write(*,*) 'nptcl_glb=' ,nptcl_glb
254      end if
255

```

```

256  !* Set # of local particles
257  nptcl_quot = nptcl_glb / nprocs
258  nptcl_rem   = mod(nptcl_glb, nprocs)
259  if (myrank == 0) then
260      write(*,*) 'nptcl_quot=' ,nptcl_quot
261      write(*,*) 'nptcl_rem=' ,nptcl_rem
262  end if
263  nptcl_loc = nptcl_quot
264  if (myrank < nptcl_rem) nptcl_loc = nptcl_loc + 1
265  call fdps_ctrl%set_nptcl_loc(psys_num, nptcl_loc)
266  i_first = 1 + nptcl_quot * myrank
267  if (myrank > (nptcl_rem-1)) then
268      i_first = i_first + nptcl_rem
269  else
270      i_first = i_first + myrank
271  end if
272  i_last = i_first + nptcl_loc - 1
273  do irank=0, nprocs-1
274      if (irank == myrank) then
275          write(*,"(4(a,1x,i8))")'myrank=' ,myrank, &
276                           ',nptcl_loc=' ,nptcl_loc, &
277                           ',i_first=' ,i_first, &
278                           ',i_last=' ,i_last
279      end if
280      call fdps_ctrl%barrier()
281  end do
282
283  !* Set local particles
284  call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num,ptcl)
285  sv = (pos_ul%x * pos_ul%y * pos_ul%z) / nptcl_glb ! specific volume
286  mass = 0.5d0*(dens_left+dens_right) * sv
287  i = 1
288  !** (1) Left-half
289  x = 0.0d0
290  do
291      y = 0.0d0
292      do
293          z = 0.0d0
294          do
295              if ((i_first <= i) .and. (i <= i_last)) then
296                  ii = i - i_first + 1
297                  ptcl(ii)%mass = mass
298                  ptcl(ii)%pos%x = x
299                  ptcl(ii)%pos%y = y
300                  ptcl(ii)%pos%z = z
301                  ptcl(ii)%dens = dens_left
302                  ptcl(ii)%eng = eng_left
303                  ptcl(ii)%smth = kernel_support_radius * 0.012d0
304                  ptcl(ii)%id = i
305              end if
306              i = i + 1
307              z = z + dz
308              if (z >= pos_ul%z) exit
309          end do
310          y = y + dy

```

```

311         if (y >= pos_ul%y) exit
312     end do
313     x = x + dx
314     if (x >= 0.5d0*pos_ul%x) exit
315   end do
316 !** (2) Right-half
317 x = 0.5d0*pos_ul%x
318 do
319   y = 0.0d0
320   do
321     z = 0.0d0
322     do
323       if ((i_first <= i) .and. (i <= i_last)) then
324         ii = i - i_first + 1
325         ptcl(ii)%mass = mass
326         ptcl(ii)%pos%x = x
327         ptcl(ii)%pos%y = y
328         ptcl(ii)%pos%z = z
329         ptcl(ii)%dens = dens_right
330         ptcl(ii)%eng = eng_right
331         ptcl(ii)%smth = kernel_support_radius * 0.012d0
332         ptcl(ii)%id = i
333       end if
334       i = i + 1
335       z = z + dz
336       if (z >= pos_ul%z) exit
337     end do
338     y = y + dy
339     if (y >= pos_ul%y) exit
340   end do
341   x = x + (dens_left/dens_right)*dx
342   if (x >= pos_ul%x) exit
343 end do
344
345 !* Check the initial distribution
346 !write(proc_num,"(i5.5)")myrank
347 !fname = "initial" // proc_num // ".dat"
348 !open(unit=9,file=trim(fname),action='write',status='replace')
349 !  do i=1,nptcl_loc
350 !    write(9,'(3es25.16e3)')ptcl(i)%pos%x, &
351 !                                ptcl(i)%pos%y, &
352 !                                ptcl(i)%pos%z
353 !  end do
354 !close(unit=9)
355
356 !* Set the end time
357 end_time = 0.12d0
358
359 !* Inform to STDOUT
360 if (fdps_ctrl%get_rank() == 0) then
361   write(*,*)"setup..."
362 end if
363 !call fdps_ctrl%ps_finalize()
364 !stop 0
365

```

```

366 end subroutine setup_IC
367
368 !-----  

369 !//////////////////////////////////////////////////////////////////////// S U B R O U T I N E ///////////////////////////////////////////////////////////////////  

370 !//////////////////////////////////////////////////////////////////////// < G E T _ T I M E S T E P > ///////////////////////////////////////////////////////////////////  

371 !-----  

372 function get_timestep(fdps_ctrl,psys_num)
373   use fdps_vector
374   use fdps_module
375   use user_defined_types
376   implicit none
377   real(kind=c_double) :: get_timestep
378   type(fdps_controller), intent(in) :: fdps_ctrl
379   integer, intent(in) :: psys_num
380   /* Local variables
381   integer :: i,nptcl_loc
382   type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
383   real(kind=c_double) :: dt_loc
384
385   /* Get # of local particles
386   nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num)
387
388   /* Get the pointer to full particle data
389   call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num,ptcl)
390   dt_loc = 1.0d30
391   do i=1,nptcl_loc
392     dt_loc = min(dt_loc, ptcl(i)%dt)
393   end do
394   nullify(ptcl)
395
396   /* Reduction
397   call fdps_ctrl%get_min_value(dt_loc,get_timestep)
398
399 end function get_timestep
400
401 !-----  

402 !//////////////////////////////////////////////////////////////////////// S U B R O U T I N E ///////////////////////////////////////////////////////////////////  

403 !//////////////////////////////////////////////////////////////////////// < I N I T I A L _ K I C K > ///////////////////////////////////////////////////////////////////  

404 !-----  

405 subroutine initial_kick(fdps_ctrl,psys_num,dt)
406   use fdps_vector
407   use fdps_module
408   use user_defined_types
409   implicit none
410   type(fdps_controller), intent(in) :: fdps_ctrl
411   integer, intent(in) :: psys_num
412   double precision, intent(in) :: dt
413   /* Local variables
414   integer :: i,nptcl_loc
415   type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
416
417   /* Get # of local particles
418   nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num)
419
420   /* Get the pointer to full particle data

```

```

421 call fdps_ctrl%get_psyst_fptr(psyst_num,ptcl)
422 do i=1,nptcl_loc
423     ptcl(i)%vel_half = ptcl(i)%vel + 0.5d0 * dt * ptcl(i)%acc
424     ptcl(i)%eng_half = ptcl(i)%eng + 0.5d0 * dt * ptcl(i)%eng_dot
425 end do
426 nullify(ptcl)
427
428 end subroutine initial_kick
429
430 !-----  

431 !//////////////////////////////////////////////////////////////////////// S U B R O U T I N E ///////////////////////////////  

432 !//////////////////////////////////////////////////////////////////////// < F U L L _ D R I F T > ///////////////////////////////  

433 !-----  

434 subroutine full_drift(fdps_ctrl,psyst_num,dt)
435     use fdps_vector
436     use fdps_module
437     use user_defined_types
438     implicit none
439     type(fdps_controller), intent(in) :: fdps_ctrl
440     integer, intent(in) :: psyst_num
441     double precision, intent(in) :: dt
442     !* Local variables
443     integer :: i,nptcl_loc
444     type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
445
446     !* Get # of local particles
447     nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psyst_num)
448
449     !* Get the pointer to full particle data
450     call fdps_ctrl%get_psyst_fptr(psyst_num,ptcl)
451     do i=1,nptcl_loc
452         ptcl(i)%pos = ptcl(i)%pos + dt * ptcl(i)%vel_half
453     end do
454     nullify(ptcl)
455
456 end subroutine full_drift
457
458 !-----  

459 !//////////////////////////////////////////////////////////////////////// S U B R O U T I N E ///////////////////////////////  

460 !//////////////////////////////////////////////////////////////////////// < P R E D I C T > ///////////////////////////////  

461 !-----  

462 subroutine predict(fdps_ctrl,psyst_num,dt)
463     use fdps_vector
464     use fdps_module
465     use user_defined_types
466     implicit none
467     type(fdps_controller), intent(in) :: fdps_ctrl
468     integer, intent(in) :: psyst_num
469     double precision, intent(in) :: dt
470     !* Local variables
471     integer :: i,nptcl_loc
472     type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
473
474     !* Get # of local particles
475     nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psyst_num)

```

```

476
477     !* Get the pointer to full particle data
478     call fdps_ctrl%get_psyst_fptr(psyst_num,ptcl)
479     do i=1,nptcl_loc
480         ptcl(i)%vel = ptcl(i)%vel + dt * ptcl(i)%acc
481         ptcl(i)%eng = ptcl(i)%eng + dt * ptcl(i)%eng_dot
482     end do
483     nullify(ptcl)
484
485 end subroutine predict
486
487 !-----  

488 !//////////////////////////////////////////////////////////////////////// S U B R O U T I N E //////////////////////////////////////////////////////////////////
489 !//////////////////////////////////////////////////////////////////////// < F I N A L _ K I C K > //////////////////////////////////////////////////////////////////
490 !-----  

491 subroutine final_kick(fdps_ctrl,psyst_num,dt)
492     use fdps_vector
493     use fdps_module
494     use user_defined_types
495     implicit none
496     type(fdps_controller), intent(in) :: fdps_ctrl
497     integer, intent(in) :: psyst_num
498     double precision, intent(in) :: dt
499     !* Local variables
500     integer :: i,nptcl_loc
501     type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
502
503     !* Get # of local particles
504     nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psyst_num)
505
506     !* Get the pointer to full particle data
507     call fdps_ctrl%get_psyst_fptr(psyst_num,ptcl)
508     do i=1,nptcl_loc
509         ptcl(i)%vel = ptcl(i)%vel_half + 0.5d0 * dt * ptcl(i)%acc
510         ptcl(i)%eng = ptcl(i)%eng_half + 0.5d0 * dt * ptcl(i)%eng_dot
511     end do
512     nullify(ptcl)
513
514 end subroutine final_kick
515
516 !-----  

517 !//////////////////////////////////////////////////////////////////////// S U B R O U T I N E //////////////////////////////////////////////////////////////////
518 !//////////////////////////////////////////////////////////////////////// < S E T _ P R E S S U R E > //////////////////////////////////////////////////////////////////
519 !-----  

520 subroutine set_pressure(fdps_ctrl,psyst_num)
521     use fdps_vector
522     use fdps_module
523     use user_defined_types
524     implicit none
525     type(fdps_controller), intent(in) :: fdps_ctrl
526     integer, intent(in) :: psyst_num
527     !* Local parameters
528     double precision, parameter :: hcr=1.4d0
529     !* Local variables
530     integer :: i,nptcl_loc

```

```

531 type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
532
533 !* Get # of local particles
534 nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psyst_num)
535
536 !* Get the pointer to full particle data
537 call fdps_ctrl%get_psyst_fptr(psyst_num,ptcl)
538 do i=1,nptcl_loc
539     ptcl(i)%pres = (hcr - 1.0d0) * ptcl(i)%dens * ptcl(i)%eng
540     ptcl(i)%snsd = dsqrt(hcr * ptcl(i)%pres / ptcl(i)%dens)
541 end do
542 nullify(ptcl)
543
544 end subroutine set_pressure
545
546 !-----  

547 !!!!!!! S U B R O U T I N E !!!!!!
548 !!!!!!! < O U T P U T > !!!!!!
549 !-----  

550 subroutine output(fdps_ctrl,psyst_num,nstep)
551 use fdps_vector
552 use fdps_module
553 use user_defined_types
554 implicit none
555 type(fdps_controller), intent(IN) :: fdps_ctrl
556 integer, intent(IN) :: psyst_num
557 integer, intent(IN) :: nstep
558 !* Local parameters
559 character(len=16), parameter :: root_dir="result"
560 character(len=16), parameter :: file_prefix_1st="snap"
561 character(len=16), parameter :: file_prefix_2nd="proc"
562 !* Local variables
563 integer :: i,nptcl_loc
564 integer :: myrank
565 character(len=5) :: file_num,proc_num
566 character(len=64) :: cmd,sub_dir, fname
567 type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
568
569 !* Get the rank number
570 myrank = fdps_ctrl%get_rank()
571
572 !* Get # of local particles
573 nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psyst_num)
574
575 !* Get the pointer to full particle data
576 call fdps_ctrl%get_psyst_fptr(psyst_num,ptcl)
577
578 !* Output
579 write(file_num,"(i5.5)")nstep
580 write(proc_num,"(i5.5)")myrank
581 fname = trim(root_dir) // "/" &
582     // trim(file_prefix_1st) // file_num // "-" &
583     // trim(file_prefix_2nd) // proc_num // ".dat"
584 open(unit=9,file=trim(fname),action='write',status='replace')
585     do i=1,nptcl_loc

```

```

586      write(9,100)ptcl(i)%id,ptcl(i)%mass, &
587                  ptcl(i)%pos%x,ptcl(i)%pos%y,ptcl(i)%pos%z, &
588                  ptcl(i)%vel%x,ptcl(i)%vel%y,ptcl(i)%vel%z, &
589                  ptcl(i)%dens,ptcl(i)%eng,ptcl(i)%pres
590      100 format(i8,1x,10e25.16e3)
591    end do
592  close(unit=9)
593  nullify(ptcl)
594
595 end subroutine output
596
597 !-----  

598 !//////////////////////////////////////////////////////////////////////// S U B R O U T I N E ///////////////////////////////  

599 !//////////////////////////////////////////////////////////////////////// < C H E C K _ C N S R V D _ V A R S > ///////////////////////////////  

600 !-----
```

```

601 subroutine check_cnsrvd_vars(fdps_ctrl,psys_num)
602   use fdps_vector
603   use fdps_module
604   use user_defined_types
605   implicit none
606   type(fdps_controller), intent(in) :: fdps_ctrl
607   integer, intent(in) :: psys_num
608   !* Local variables
609   integer :: i,nptcl_loc
610   type(full_particle), dimension(:), pointer :: ptcl
611   type(fdps_f64vec) :: mom_loc,mom
612   real(kind=c_double) :: eng_loc,eng
613
614   !* Get # of local particles
615   nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num)
616
617   !* Get the pointer to full particle data
618   call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num,ptcl)
619   mom_loc = 0.0d0; eng_loc = 0.0d0
620   do i=1,nptcl_loc
621     mom_loc = mom_loc + ptcl(i)%vel * ptcl(i)%mass
622     eng_loc = eng_loc + ptcl(i)%mass &
623                 *(ptcl(i)%eng &
624                   +0.5d0*ptcl(i)%vel*ptcl(i)%vel)
625   end do
626   nullify(ptcl)
627
628   !* Reduction & output
629   call fdps_ctrl%get_sum(eng_loc,eng)
630   call fdps_ctrl%get_sum(mom_loc%x,mom%x)
631   call fdps_ctrl%get_sum(mom_loc%y,mom%y)
632   call fdps_ctrl%get_sum(mom_loc%z,mom%z)
633   if (fdps_ctrl%get_rank() == 0) then
634     write(*,100)eng
635     write(*,100)mom%x
636     write(*,100)mom%y
637     write(*,100)mom%z
638     100 format(1es25.16e3)
639   end if
640
```

```
641 end subroutine check_cnsrvd_vars
```

6 拡張機能の解説

6.1 P³M コード

本節では、FDPS の拡張機能 Particle Mesh (以下、PM と省略する) の使用方法について、P³M(Particle-Particle-Particle-Mesh) 法のサンプルコードを用いて解説を行う。このサンプルコードでは、塩化ナトリウム (NaCl) 結晶の系全体の結晶エネルギーを P³M 法で計算し、結果を解析解と比較する。P³M 法では、力、及び、ポテンシャルエネルギーの計算を、Particle-Particle(PP) パートと Particle-Mesh(PM) パートに split して行われる。このサンプルコードでは PP パートを FDPS 標準機能を用いて計算し、PM パートを FDPS 拡張機能を用いて計算する。なお、拡張機能 PM の仕様の詳細は、仕様書 9.2 節で説明されているので、そちらも参照されたい。

6.1.1 サンプルコードの場所と作業ディレクトリ

サンプルコードの場所は、\$(FDPS)/sample/fortran/p3m である。まずは、そこに移動する。

```
$ cd $(FDPS)/sample/fortran/p3m
```

サンプルコードはユーザ定義型と相互作用関数が実装された user_defined.F90、ユーザコードのそれ以外の部分が実装された f_main.F90、GCC と intel コンパイラ用の Makefile である Makefile と Makefile.intel から構成される。

6.1.2 ユーザー定義型

本節では、FDPS の機能を用いて P³M 法の計算を行うにあたって、ユーザーが記述しなければならない派生データ型について記述する。

6.1.2.1 FullParticle 型

ユーザーは FullParticle 型を記述しなければならない。Listing 37 に、サンプルコードの FullParticle 型を示す。FullParticle 型には、計算を行うにあたって、粒子が持っているべき全ての物理量が含まれている必要がある。

Listing 37: FullParticle 型

```

1 type, public, bind(c) :: nbody_fp !$fdps FP
2   !$fdps copyFromForce nbody_pp_results (pot,pot) (agrv,agrv)
3   !$fdps copyFromForcePM agrv_pm
4   integer(kind=c_long_long) :: id
5   real(kind=c_double) :: m !$fdps charge
6   real(kind=c_double) :: rc !$fdps rsearch
7   type(fdps_f64vec) :: x !$fdps position

```

```

8     type(fdps_f64vec) :: v,v_half
9     type(fdps_f64vec) :: agrv
10    real(kind=c_double) :: pot
11    type(fdps_f32vec) :: agrv_pm
12    real(kind=c_float) :: pot_pm
13 end type nbody_fp

```

この派生データ型が FullParticle 型であることを示すため、次の指示文を記述している：

```
type, public, bind(c) :: nbody_fp !$fdps FP
```

P^3M シミュレーションにおける相互作用はカットオフを持つ長距離力である。そのため、必須物理量としてカットオフ半径が加わる。現在の FDPS の仕様では、カットオフ半径の指定は探索半径の指定 (§ 4.2 参照) と同様に行う。次の指示文は、どのメンバ変数がどの必須物理量に対応するかを指定するものである：

```

real(kind=c_double) :: m !$fdps charge
real(kind=c_double) :: rc !$fdps rsearch
type(fdps_f64vec) :: x !$fdps position

```

FullParticle 型は Force 型との間でデータコピーを行う。ユーザは指示文を使い、FDPS にデータコピーの仕方を教えなければならない。また、拡張機能 PM を用いて相互作用計算を行う場合、FullParticle 型には PM モジュールで計算した相互作用計算の結果をどのメンバ変数で受け取るのか指示する指示文を記述する必要がある。本サンプルコードでは、以下のように記述している：

```
!$fdps copyFromForce nbody_pp_results (pot,pot) (agrv,agrv)
!$fdps copyFromForcePM agrv_pm
```

6.1.2.2 EssentialParticleI 型

ユーザーは EssentialParticleI 型を記述しなければならない。EssentialParticleI 型には、PP パートの Force 計算を行う際、 i 粒子が持っているべき全ての物理量をメンバ変数として持っている必要がある。また、本チュートリアル中では、EssentialParticleJ 型も兼ねているため、 j 粒子が持っているべき全ての物理量もメンバ変数として持っている必要がある。Listing 38 に、サンプルコードの EssentialParticleI 型を示す。

Listing 38: EssentialParticleI 型

```

1 type, public, bind(c) :: nbody_ep !$fdps EPI,EPJ
2   !$fdps copyFromFP nbody_fp (id,id) (m,m) (rc,rc) (x,x)
3   integer(kind=c_long_long) :: id
4   real(kind=c_double) :: m !$fdps charge
5   real(kind=c_double) :: rc !$fdps rsearch
6   type(fdps_f64vec) :: x !$fdps position
7 end type nbody_ep

```

まず、ユーザは指示文を用いて、この派生データ型が EssentialParticleI 型かつ EssentialParticleJ 型であることを FDPS に教えなければならない。本サンプルコードでは、以下のように記述している：

```
type, public, bind(c) :: nbody_ep !$fdps EPI,EPJ
```

次に、ユーザはこの派生データ型のどのメンバ変数がどの必須物理量に対応するのかを指示文によって指定しなければならない。今回は相互作用がカットオフ有りの長距離力であるため、カットオフ半径の指定も必要である。本サンプルコードでは、以下のように記述している：

```
real(kind=c_double) :: m !$fdps charge
real(kind=c_double) :: rc !$fdps rsearch
type(fdps_f64vec) :: x !$fdps position
```

EssentialParticleI 型と EssentialParticleJ 型は FullParticle 型からデータを受け取る。ユーザは FullParticle 型のどのメンバ変数を EssentialParticle?型 (?=I,J) のどのメンバ変数にコピーするのかを、指示文を用いて指定する必要がある。本サンプルコードでは、以下のように記述している：

```
!$fdps copyFromFP nbody_fp (id,id) (m,m) (rc,rc) (x,x)
```

6.1.2.3 Force 型

ユーザーは Force 型を記述しなければならない。Force 型は、PP パートの Force の計算を行った際にその結果として得られる全ての物理量をメンバ変数として持っている必要がある。本サンプルコードの Force 型を Listing 39 に示す。このサンプルコードでは、Force は Coulomb 相互作用計算のみであるため、Force 型が 1 つ用意されている。

Listing 39: Force 型

```
1 type, public, bind(c) :: nbody_pp_results !$fdps Force
2   !$fdps clear
3   real(kind=c_double) :: pot
4   type(fdps_f64vec) :: agrv
5 end type nbody_pp_results
```

まず、ユーザはこの派生データ型が Force 型であることを指示文によって指定する必要がある。本サンプルコードでは、以下のように記述している：

```
type, public, bind(c) :: nbody_pp_results !$fdps Force
```

この派生データ型は Force 型であるから、ユーザは必ず、相互作用計算における積算対象のメンバ変数の初期化方法を指定する必要がある。本サンプルコードでは Force 型のすべてのメンバ変数にデフォルトの初期化方法を指定するため、単に、キーワード clear の指示文を

記述している:

```
!$fdps clear
```

6.1.2.4 相互作用関数 calcForceEpEp

ユーザーは相互作用関数 calcForceEpEp を記述しなければならない。calcForceEpEp には、PP パートの Force の計算の具体的な内容を書く必要がある。calcForceEpEp は、サブルーチンとして実装されなければならない。引数は、EssentialParticleI の配列、EssentialParticleI の個数、EssentialParticleJ の配列、EssentialParticleJ の個数、Force 型の配列である。本サンプルコードの calcForceEpEp の実装を Listing 40 に示す。

Listing 40: 相互作用関数 calcForceEpEp

```

1 subroutine calc_force_ep_ep(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
2     integer(c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
3     type(nbody_ep), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
4     type(nbody_ep), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
5     type(nbody_pp_results), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
6     !* Local variables
7     integer(c_int) :: i,j
8     real(c_double) :: rij,rinv,rinv3,xi
9     type(fdps_f64vec) :: dx
10
11    do i=1,n_ip
12        do j=1,n_jp
13            dx%x = ep_i(i)%x%x - ep_j(j)%x%x
14            dx%y = ep_i(i)%x%y - ep_j(j)%x%y
15            dx%z = ep_i(i)%x%z - ep_j(j)%x%z
16            rij = dsqrt(dx%x * dx%x &
17                           + dx%y * dx%y &
18                           + dx%z * dx%z)
19            if ((ep_i(i)%id == ep_j(j)%id) .and. (rij == 0.0d0)) cycle
20            rinv = 1.0d0/rij
21            rinv3 = rinv*rinv*rinv
22            xi = 2.0d0*rij/ep_i(i)%rc
23            f(i)%pot = f(i)%pot + ep_j(j)%m * S2_pcut(xi) * rinv
24            f(i)%agrv%x = f(i)%agrv%x + ep_j(j)%m * S2_fcut(xi) * rinv3 *
25                           dx%x
26            f(i)%agrv%y = f(i)%agrv%y + ep_j(j)%m * S2_fcut(xi) * rinv3 *
27                           dx%y
28            f(i)%agrv%z = f(i)%agrv%z + ep_j(j)%m * S2_fcut(xi) * rinv3 *
29                           dx%z
30        end do
31        !* Self-interaction term
32        f(i)%pot = f(i)%pot - ep_i(i)%m * (208.0d0/(70.0d0*ep_i(i)%rc))
33    end do
34
35 end subroutine calc_force_ep_ep

```

P³M 法の PP パートは、(距離に関する)カットオフ付きの 2 体相互作用である。そのため、ポテンシャルと加速度の計算にカットオフ関数 (S2_pcut(), S2_fcut()) が含まれていること

に注意されたい。ここで、各カットオフ関数は、粒子の形状関数 $S(r)$ が $S2(r)$ のときのカットオフ関数である必要がある。ここで、 $S2(r)$ は Hockney & Eastwood (1988) の式 (8.3) で定義される形状関数で、以下の形を持つ:

$$S2(r) = \begin{cases} \frac{48}{\pi a^4} \left(\frac{a}{2} - r \right) & r < a/2, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (1)$$

ここで、 r は粒子からの距離、 a は形状関数のスケール長である。粒子の電荷量を q とすれば、この粒子が作る電荷密度分布 $\rho(r)$ は $\rho(r) = q S2(r)$ と表現される。これは r に関して線形な密度分布を仮定していることを意味する。PP パートのカットオフ関数が $S2(r)$ を仮定したものでなければならない理由は、PM パートのカットオフ関数が S2 型形状関数を仮定して実装されているためである (PM パートと PP パートのカットオフ関数は同じ形状関数に基づく必要がある)。

カットオフ関数はユーザが定義する必要がある。サンプルコードの冒頭に `S2_pcut()` と `S2_fcut()` の実装例がある。これらの関数では、Hockney & Eastwood (1988) の式 (8-72), (8-75) が使用されている。カットオフ関数は、PP 相互作用が以下の形となるように定義されている:

$$\Phi_{\text{PP}}(\mathbf{r}) = \frac{m}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} S2_{\text{pcut}}(\xi) \quad (2)$$

$$\mathbf{f}_{\text{PP}}(\mathbf{r}) = \frac{m(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} S2_{\text{fcut}}(\xi) \quad (3)$$

ここで、 $\xi = 2|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/a$ である。本サンプルコードでは a を変数 `rc` で表現している。

Hockney & Eastwood (1988) の式 (8-75) を見ると、 $r = 0$ のとき、メッシュポテンシャル ϕ^m が次の有限値を持つことがわかる (ここで、 $1/4\pi\varepsilon_0$ の因子は省略した):

$$\phi^m(0) = \frac{208}{70a} \quad (4)$$

この項はサンプルコードの i 粒子のループの最後で考慮されている:

```
1 f(i)%pot = f(i)%pot - ep_i(i)%m * (208.0d0/(70.0d0*ep_i(i)%rc))
```

この項を考慮しないと解析解と一致しないことに注意する必要がある。

6.1.2.5 相互作用関数 calcForceEpSp

ユーザーは相互作用関数 `calcForceEpSp` を記述しなければならない^{注 5)}。`calcForceEpSp` には、粒子-超粒子間相互作用計算の具体的な内容を書く必要がある。`calcForceEpSp` は、サブルーチンとして実装されなければならない。引数は、`EssentialParticleI` の配列、`EssentialParticleI` の個数、超粒子型の配列、超粒子型の個数、`Force` 型の配列である。本サンプルコードの `calcForceEpSp` の実装を Listing 41 に示す。

^{注 5)}冒頭で述べたように、本サンプルコードでは相互作用計算に P^3M 法を用いる。FDPS の枠組み内で、これを実現するため、後述するように、見込み角の基準値 θ を 0 に指定して相互作用計算を行う。このため、粒子-超粒子相互作用は発生しないはずである。しかしながら、API

`calc_force_all_and_write_back` に、粒子-超粒子間相互作用を計算する関数のアドレスを渡す必要があるため、相互作用関数 `calcForceEpSp` を定義する必要がある。

Listing 41: 相互作用関数 calcForceEpSp

```

1 subroutine calc_force_ep_sp(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
2     integer(c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
3     type(nbody_ep), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
4     type(fdps_spj_monopole_cutoff), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
5     type(nbody_pp_results), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
6     !* Local variables
7     integer(c_int) :: i,j
8     real(c_double) :: rij,rinv,rinv3,xi
9     type(fdps_f64vec) :: dx
10
11    do i=1,n_ip
12        do j=1,n_jp
13            dx%x = ep_i(i)%x%x - ep_j(j)%pos%x
14            dx%y = ep_i(i)%x%y - ep_j(j)%pos%y
15            dx%z = ep_i(i)%x%z - ep_j(j)%pos%z
16            rij = dsqrt(dx%x * dx%x &
17                            + dx%y * dx%y &
18                            + dx%z * dx%z)
19            rinv = 1.0d0/rij
20            rinv3 = rinv*rinv*rinv
21            xi = 2.0d0*rij/ep_i(i)%rc
22            f(i)%pot = f(i)%pot + ep_j(j)%mass * S2_pcut(xi) * rinv
23            f(i)%agrv%x = f(i)%agrv%x + ep_j(j)%mass * S2_fcut(xi) * rinv3
24                            * dx%x
25            f(i)%agrv%y = f(i)%agrv%y + ep_j(j)%mass * S2_fcut(xi) * rinv3
26                            * dx%y
27            f(i)%agrv%z = f(i)%agrv%z + ep_j(j)%mass * S2_fcut(xi) * rinv3
28                            * dx%z
29        end do
      end do
end subroutine calc_force_ep_sp

```

6.1.3 プログラム本体

本節では、サンプルコード本体について解説を行う。詳細な説明に入る前に、サンプルコードの内容と全体構造について説明を与える。[6.1](#) 節で述べたように、このサンプルコードでは NaCl 結晶の結晶エネルギーを P³M 法によって計算し解析解と比較する。NaCl 結晶は一様格子状に並んだ粒子として表現される。Na と Cl は互い違いに並んでおり、Na に対応する粒子は正の電荷を、Cl に対応する粒子は負の電荷を持っている。この粒子で表現された結晶を、大きさが [0, 1)³ の周期境界ボックスの中に配置し、結晶エネルギーを計算する。結晶エネルギーの計算精度は周期境界ボックスの中の粒子数や粒子の配置に依存するはずなので、サンプルコードでは、これらを変えてエネルギーの相対誤差を調べ、結果をファイルに出力する内容となっている。

コードの全体構造は以下のようになっている:

- (1) FDPS で使用するオブジェクトの生成と初期化
- (2) 指定された粒子数と配置の結晶を生成 (メインルーチン)

- の `setup_NaCl_crystal()`)
(3) 各粒子のポテンシャルエネルギーを P³M 法で計算 (メインルーチン内)
(4) 系全体のエネルギーを計算し、解析解と比較 (メインルーチンの `calc_energy_error()`)
(5) (2) ~ (4) を繰り返す

以下で、個々について詳しく説明を行う。

6.1.3.1 `fdps_controller` 型オブジェクトの生成

FDPS Fortran インターフェースにおいて、FDPS の API はすべて Fortran 2003 のクラス `FDPS_controller` のメンバ関数として提供される。このクラスは、インターフェースプログラムの 1 つである `FDPS_module.F90` の中の、モジュール `fdps_module` 内で定義されている。したがって、ユーザは FDPS の API を使用するために、`FDPS_controller` 型オブジェクトを生成しなければならない。本サンプルコードでは、`FDPS_controller` 型オブジェクト `fdps_ctrl` をメインルーチンで生成している：

Listing 42: `fdps_controller` 型オブジェクトの生成

```

1 subroutine f_main()
2   use fdps_module
3   implicit none
4   !* Local variables
5   type(fdps_controller) :: fdps_ctrl
6
7   ! Do something
8
9 end subroutine f_main

```

ここに示したコードは実際にサンプルコードから必要な部分だけを取り出したものであることに注意して頂きたい。

上記の理由から、以下の説明において、FDPS の API はこのオブジェクトのメンバ関数として呼び出されていることに注意されたい。

6.1.3.2 開始、終了

まずは、FDPS の初期化/開始を行う必要がある。次のように、メインルーチンに記述する。

Listing 43: FDPS の開始

```

1 fdps_ctrl%ps_initialize();

```

FDPS は、開始したら明示的に終了させる必要がある。今回は、プログラムの終了と同時に FDPS も終了させるため、メインルーチンの最後に次のように記述する。

Listing 44: FDPS の終了

```

1 fdps_ctrl%ps_finalize();

```

6.1.3.3 オブジェクトの生成と初期化

FDPS の初期化に成功した場合、ユーザーはコード中で用いるオブジェクトを作成する必要がある。本節では、オブジェクトの生成/初期化の仕方について、解説する。

6.1.3.3.1 オブジェクトの生成

P^3M 法の計算では、粒子群クラス、領域クラスに加え、PP パートの計算用の tree を 1 本、さらに PM パートの計算に必要な ParticleMesh オブジェクトの生成が必要である。

Listing 45: オブジェクトの生成

```

1 call fdps_ctrl%create_psys(psys_num, 'nbody_fp')
2 call fdps_ctrl%create_dinfo(dinfo_num)
3 call fdps_ctrl%create_pm(pm_num)
4 call fdps_ctrl%create_tree(tree_num, &
5                           "Long, nbody_pp_results, nbody_ep, nbody_ep,
                           MonopoleWithCutoff")

```

ここに示したコードは実際にサンプルコードから該当箇所だけを取り出したものであることに注意して頂きたい。

6.1.3.3.2 オブジェクトの初期化

ユーザーはオブジェクトを生成したら、そのオブジェクトを使用する前に、初期化を行う必要がある。以下で、各オブジェクトの初期化の仕方について解説を行う。

(i) 粒子群オブジェクトの初期化 粒子群オブジェクトの初期化は、以下のように行う:

Listing 46: 粒子群オブジェクトの初期化

```

1 call fdps_ctrl%init_psys(psys_num)

```

サンプルコードではメインルーチンの冒頭で呼び出されている。

(ii) 領域オブジェクトの初期化 領域オブジェクトの初期化は、以下のように行う:

Listing 47: 領域オブジェクトの初期化

```

1 call fdps_ctrl%init_dinfo(dinfo_num, coef_ema)

```

サンプルコードではemainルーチンの冒頭で呼び出されている。

初期化が完了した後、領域オブジェクトには境界条件と境界の大きさをセットする必要がある。サンプルコードでは、この作業は粒子分布を決定するサブルーチン

setup_NaCl_crystal の内で行われている:

```

1 call fdps_ctrl%set_boundary_condition(dinfo_num, fdps_bc_periodic_xyz)
2 pos_ll%x = 0.0d0; pos_ll%y = 0.0d0; pos_ll%z = 0.0d0
3 pos_ul%x = 1.0d0; pos_ul%y = 1.0d0; pos_ul%z = 1.0d0
4 call fdps_ctrl%set_pos_root_domain(dinfo_num, pos_ll, pos_ul)

```

(iii) ツリーオブジェクトの初期化 相互作用ツリーオブジェクトの初期化も、API

`init_tree` を使って、以下のように行う:

Listing 48: ツリーオブジェクトの初期化

```
1 call fdps_ctrl%init_tree(tree_num, 3*nptcl_loc, theta, &
2                           n_leaf_limit, n_group_limit)
```

ツリーオブジェクトの API

`init_tree` には引数として、大雑把な粒子数を渡す必要がある。これは API の第 2 引数として指定する。上記の例では、API が呼ばれた時点でのローカル粒子数の 3 倍の値がセットされるようになっている。一方、API の第 3 引数は省略可能引数で、tree 法で力を計算するときの opening angle criterion

θ を指定する。本サンプルコードでは PP パートの計算で粒子-超粒子相互作用を発生させないようにするために、 $\theta = 0$ を指定している。

(iv) ParticleMesh オブジェクトの初期化 特に明示的に初期化を行う必要はない。

6.1.3.4 粒子分布の生成

本節では、粒子分布を生成するサブルーチン `setup_NaCl_crystal` の動作とその中で呼ばれている FDPS の API について解説を行う。このサブルーチンは、周期境界ボックスの 1 次元あたりの粒子数と、原点 $(0, 0, 0)$ に最も近い粒子の座標を引数として、3 次元粒子分布を生成する。サンプルコードでは、これらのパラメータは派生データ型 `crystal_parameters` のオブジェクト `NaCl_params` を使って渡されている:

```
1 ! In user_defined.F90
2 type, public, bind(c) :: crystal_parameters
3   integer(kind=c_int) :: nptcl_per_side
4   type(fdps_f64vec) :: pos_vertex
5 end type crystal_parameters
6 ! In f_main.F90
7 type(crystal_parameters) :: NaCl_params
8 call setup_NaCl_crystal(fdps_ctrl, &
9                         psys_num, &
10                        dinfo_num, &
11                        NaCl_params)
```

`setup_NaCl_crystal` の前半部分において、渡されたパラメータを使って粒子分布を生成している。この結晶の系全体のエネルギーは

$$E = -\frac{N\alpha m^2}{R_0} \quad (5)$$

と解析的に書ける。ここで、 N は分子の総数（原子の数は $2N$ 個）、 m は粒子の電荷量、 R_0 は最隣接原子間距離、 α はマーデリング（Madelung）定数である。NaCl 結晶の場合、 $\alpha \approx 1.747565$ である（例えば、キッテル著「固体物理学入門（第 8 版）」を参照せよ）。計算結果をこの解析

解と比較するとき、系全体のエネルギーが粒子数に依存しては不便である。そこで、サンプルコードでは、系全体のエネルギーが粒子数に依存しないように、粒子の電荷量 m を

$$\frac{2Nm^2}{R_0} = 1 \quad (6)$$

となるようにスケールしていることに注意されたい。

粒子分布の生成後、FDPS の API を使って、領域分割と粒子交換を行っている。以下で、これらの API について解説する。

6.1.3.4.1 領域分割の実行

粒子分布に基いて領域分割を実行するには、領域オブジェクトの API `decompose_domain_all` を使用する:

Listing 49: 領域分割の実行

```
1 call fdps_ctrl%decompose_domain_all(dinfo_num, psys_num)
```

6.1.3.4.2 粒子交換の実行

領域情報に基いてプロセス間の粒子の情報を交換するには、粒子群オブジェクトの API `exchange_particle` を使用する:

Listing 50: 粒子交換の実行

```
1 call fdps_ctrl%exchange_particle(psys_num, dinfo_num)
```

6.1.3.5 相互作用計算の実行

粒子分布を決定し、領域分割・粒子交換が終了したら、相互作用の計算を行う。サンプルコードでは、この作業をメインルーチンで行っている:

Listing 51: 相互作用計算の実行

```
1 !* [4] Compute force and potential with P^3M method
2 !* [4-1] Get the pointer to FP and # of local particles
3 nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num)
4 call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num, ptcl)
5 !* [4-2] PP part
6 pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_force_ep_ep)
7 pfunc_ep_sp = c_funloc(calc_force_ep_sp)
8 call fdps_ctrl%calc_force_all_and_write_back(tree_num,      &
9                                pfunc_ep_ep,      &
10                               pfunc_ep_sp,      &
11                               psys_num,          &
12                               dinfo_num)
13 !* [4-3] PM part
14 call fdps_ctrl%calc_pm_force_all_and_write_back(pm_num,      &
```

```

15                               psys_num, &
16                               dinfo_num)
17 do i=1,nptcl_loc
18   pos32 = ptcl(i)%x
19   call fdps_ctrl%get_pm_potential(pm_num, pos32, ptcl(i)%pot_pm)
20 end do
21 !* [4-4] Compute the total acceleration and potential
22 do i=1,nptcl_loc
23   ptcl(i)%pot = ptcl(i)%pot - ptcl(i)%pot_pm
24   ptcl(i)%agrv = ptcl(i)%agrv - ptcl(i)%agrv_pm
25 end do

```

PP パートの相互作用計算には API `calc_force_all_and_write_back`、PM パートの相互作用計算には API `calc_pm_force_all_and_write_back` を用いている。PM パートの計算の後に、加速度とポテンシャルの総和を計算している。この総和計算を引き算で行っていることに注意して頂きたい。引き算を使用する理由は、FDPS の拡張機能 PM は重力を想定してポテンシャルを計算するからである。すなわち、拡張機能 PM では、電荷 $m(> 0)$ は正のポテンシャルを作るべきところを、質量 $m > 0$ の重力ポテンシャルとして計算する。このポテンシャルは負値である。したがって、拡張機能 PM を Coulomb 相互作用で使用するには符号反転が必要となる。

6.1.3.6 エネルギー相対誤差の計算

エネルギーの相対誤差の計算は関数 `calc_energy_error` で行っている。ここでは、解析解の値としては $E_0 \equiv 2E = -1.7475645946332$ を採用した。これは、PM³(Particle-Mesh Multipole Method) で数値的に求めた値である。

6.1.4 コンパイル

本サンプルコードでは FFTW ライブラリ (<http://www.fftw.org>) を使用するため、ユーザ環境に FFTW3 をインストールする必要がある。コンパイルは、付属の `Makefile` 内の変数 `FFTW_LOC` と `FDPS_LOC` に、FFTW と FDPS のインストール先の PATH をそれぞれ指定し、`make` コマンドを実行すればよい。

```
$ make
```

コンパイルがうまく行けば、`work` ディレクトリに実行ファイル `p3m.x` が作成されているはずである。

6.1.5 実行

FDPS 拡張機能の仕様から、本サンプルコードはプロセス数が 2 以上の MPI 実行でなければ、正常に動作しない。そこで、以下のコマンドでプログラムを実行する:

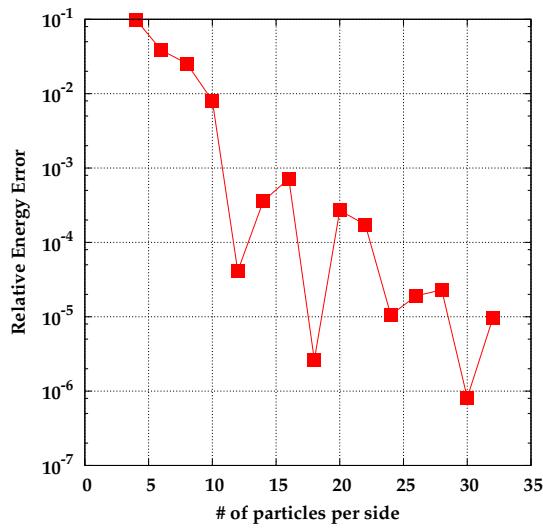


図 3: 1辺あたりの粒子数とエネルギー相対誤差の関係 (メッシュ数は 16^3 、カットオフ半径は $3/16$)

```
$ MPIRUN -np NPROC ./p3m.x
```

ここで、“MPIRUN”には mpirun や mpiexec などの mpi 実行プログラムが、“NPROC”にはプロセス数が入る。

6.1.6 結果の確認

計算が終了すると、work フォルダ下にエネルギーの相対誤差を記録したファイルが出力される。結果をプロットすると、図 3 のようになる。

7 より実用的なアプリケーションの解説

前節までは、比較的単純なサンプルコードを用いて、FDPS の基本的な機能について解説を行ってきた。しかしながら、実際の研究では、複数の粒子種の取り扱いが必要になる等、より複雑なアプリケーションを書く必要がある。そこで、本節では、より実用的なサンプルコードを使って、FDPS の他の機能について解説を行う。記述を簡潔にするため、読者は前節までの内容を理解しているものと仮定する。

7.1 N 体/SPH コード

本節では、より実用的なアプリケーションの一例として円盤銀河の時間発展を計算する N 体/SPH サンプルコードの解説を行う。このサンプルコードは、重力のみで相互作用するダークマターと星を N 体粒子、重力及び流体相互作用を行うガスを SPH 粒子として表現する。重力計算は Tree 法で、流体計算は SPH 法を用いて行う。SPH 法は Springel & Hernquist [2002, MNRAS, 333, 649] 及び Springel [2005, MNRAS, 364, 1105] で提案された方法（以下、簡単のため、Springel の方法と呼ぶ）を使用している。本解説を読むことにより、ユーザは、FDPS で複数の粒子種を扱う方法を学ぶことができる。

以下では、まずははじめにコードの使用方法について説明を行う。次に Springel の方法について簡単な解説を行った後、サンプルコードの中身について具体的に解説する。

7.1.1 コードの使用方法

前節で述べた通り、本コードは円盤銀河の N 体/SPH シミュレーションを行うコードである。ダークマターと星の初期条件は、銀河の初期条件を作成するソフトウェア MAGI (Miki & Umemura [2018, MNRAS, 475, 2269]) で作成したファイルを読み込んで設定する。一方、ガスの初期条件は本コードの内部で作成する。したがって、以下の手順で本コードを使用する。

- ディレクトリ \$(FDPS)/sample/fortran/nbody+sph に移動
- カレントディレクトリにある Makefile を編集
- MAGI を使って初期条件に対応する粒子データを生成し、./magi_data/dat 以下に配置
- コマンドライン上で make を実行
- nbodysph.out ファイルの実行
- 結果の解析

以下、順に説明していく。

7.1.1.1 ディレクトリ移動

サンプルコードの場所は、\$(FDPS)/sample/fortran/nbody+sph である。まずは、そこに移動する。

7.1.1.2 サンプルコードのファイル構成

以下はサンプルコードのファイル構成である。

```
$ ls | awk '{print $0}'
Makefile
Makefile.K
Makefile.intel
Makefile.ofp
f_main.F90
ic.F90
job.K.sh
job.ofp.sh
leapfrog.F90
macro_defs.h
magi_data/
mathematical_constants.F90
physical_constants.F90
test.py
tipsy_file_reader.cpp
tipsy_file_reader.h
user_defined.F90
```

各ソースファイルの内容について簡単に解説を行う。まず、ic.F90 には初期条件を作成するサブルーチンが実装されている。初期条件は円盤銀河の他、複数用意されている（後述）。leapfrog.F90 には粒子の軌道の時間積分を Leapfrog 法を用いて行うサブルーチンが実装されている。macro_defs.h には計算を制御するためのマクロが定義されている。f_main.F90 にはアプリケーションのメインルーチンが実装されている。mathematical_constants.F90 には数学定数が、physical_constants.F90 には物理定数が定義されている。tipsy_file_reader.cpp 及び tipsy_file_reader.h には MAGI が出力した粒子データを読むための関数が定義されている。user_defined.F90 には、ユーザ定義型や相互作用関数が実装されている。

ディレクトリ magi_data には、銀河の初期条件を作成するソフトウェア MAGI に入力するパラメータファイル (magi_data/cfg/*) と MAGI を動作させるスクリプト (magi_data/sh/run.sh) が格納されている。

7.1.1.3 Makefile の編集

Makefile の編集項目は以下の通りである。

- 変数 CXX に使用する C++コンパイラを代入する。
- 変数 FC に使用する Fortran コンパイラを代入する。
- 変数 CXXFLAGS に C++コンパイラのコンパイルオプションを指定する。
- 変数 FCFLAGS に Fortran コンパイラのコンパイルオプションを指定する。
- 本コードでは計算を制御するためにいくつかのマクロを用意している。表 1 にマクロ名とその定義の対応を示した。また、本コードには、INITIAL_CONDITION の値に応じて自動的に設定されて使用されるマクロも存在する。これらは一般に変更する必要はないが、詳細は `macro_defs.h` を参照して頂きたい。
- 本コードでは重力計算に x86 版 Phantom-GRAPE ライブラリを使用することができる。Phantom-GRAPE ライブラリを使用する場合、Makefile の変数 `use_phantom_grape_x86` の値を yes にする。

OpenMP や MPI の使用/不使用の指定に関しては、第 3 節を参照して頂きたい。

マクロ名	定義
INITIAL_CONDITION	初期条件の種類の指定、或いは、コードの動作の指定に使用されるマクロ。0から3までのいずれかの値を取る必要がある。値に応じて、次のように指定される。0:円盤銀河の初期条件を選択、1:Cold collapse 問題の初期条件を選択、2:Evrard test 問題の初期条件を選択、3:ガラス状に分布したSPH粒子データを生成するモードで実行ファイルを作成
ENABLE_VARIABLE_SMOOTHING_LENGTH	smoothing length が可変/固定を制御するマクロ。定義されている場合、可変となり Springel の方法で SPH 計算が行われる。未定義の場合、固定長カーネルの SPH コードとなる。
USE_ENTROPY	流体の熱力学状態を記述する独立変数としてエントロピーを使うか単位質量あたりの内部エネルギーを使用するかを指定するマクロ。定義されている場合エントロピーが用いられる。但し、後述するマクロ ISOTHERMAL_EOS が定義されている場合には、単位質量あたりの内部エネルギーが強制的に使用される(圧力の計算に内部エネルギーを使用する)。
USE_BALSARA_SWITCH	Balsara switch (Balsara [1995, JCP, 121, 357]) の使用/不使用を制御するマクロ。定義されている場合は使用する。
USE_PRESCR_OF_THOMAS_COUCHMAN_1992	Thomas & Couchman [1992, MNRAS, 257, 11] で提案された SPH 計算の tensile 不安定を防ぐ簡単な方法を使用するかを制御するマクロ。定義されている場合は使用する。
ISOTHERMAL_EOS	流体を等温で取り扱うかどうかを指定するマクロ。定義されている場合は等温で扱い、未定義の場合にはエントロピー方程式、或いは、内部エネルギー方程式が解いて、熱力学的状態を時間発展させる。
READ_DATA_WITH_BYTESWAP	MAGI の粒子データを読み込む際に基本データ型単位で byteswap してデータを読み込むかを制御するマクロ。定義されている場合は byteswap する。

表 1: コンパイル時マクロの種類と定義

7.1.1.4 MAGI を使った粒子データの生成

前述した通り、ユーザは事前に銀河の初期条件を作成するソフトウェア MAGI を使い、以下に指定する手順でデータを作成する必要がある。MAGI を利用できないユーザは、指定するサイトからこちらが用意したデータをダウンロードすることも可能である。以下、各場合について詳しく述べる。

MAGI を使ってデータ作成を行う場合 以下の手順でデータ作成を行う。

1. <https://bitbucket.org/ymiki/magi> から MAGI をダウンロードし、Web の “How to compile MAGI” に記載された手順に従って、適当な場所にインストールする。但し、本サンプルコードは TIPSY ファイルの粒子データ読み込みしかサポートしていないため、MAGI は USE_TIPSY_FORMAT=ON の状態でビルドされている必要がある。
2. `./magi_data/sh/run.sh` を開き、変数 MAGI_INSTALL_DIR にコマンド `magi` がインストールされたディレクトリを、変数 NTOT に希望する N 体粒子の総数をセットする（ダークマターと星への振り分けは MAGI が自動的に行う）。
3. `./magi_data/cfg/*` を編集し、ダークマターと銀河のモデルを指定する。指定方法の詳細は上記サイトか、或いは、Miki & Umemura [2018, MNRAS, 475, 2269] の第 2.4 節を参照のこと。デフォルトの銀河モデル（以下、デフォルトモデル）は次の 4 成分から構成される：
 - (i) ダークマターハロー（NFW profile, $M = 10^{12} \text{ M}_\odot$, $r_s = 21.5 \text{ kpc}$, $r_c = 200 \text{ kpc}$, $\Delta_c = 10 \text{ kpc}$ ）
 - (ii) バルジ（King モデル, $M = 5 \times 10^{10} \text{ M}_\odot$, $r_s = 0.7 \text{ kpc}$, $W_0 = 5$ ）
 - (iii) thick disk (Sérsic profile, $M = 2.5 \times 10^{10} \text{ M}_\odot$, $r_s = 3.5 \text{ kpc}$, $n = 1.5$, $z_d = 1 \text{ kpc}$, $Q_{T,\min} = 1.0$ ）
 - (iv) thin disk (exponential disk, $M = 2.5 \times 10^{10} \text{ M}_\odot$, $r_s = 3.5 \text{ kpc}$, $z_d = 0.5 \text{ kpc}$, $Q_{T,\min} = 1.0$ ）

デフォルトモデルでは、2 つの星円盤は bar モードに対してわずかに不安定であるため、弱い棒状構造を持つ渦巻き銀河になることが期待される初期条件となっている。MAGI の最新のリリース（version 1.1.1 [2019 年 7 月 19 日時点]）では、従来のリリースとデフォルトの動作モードが変更されたため、thick disk と thin disk のパラメータ指定の仕方が FDPS 5.0d 以前から変わっていることに注意されたい。具体的には、従来の MAGI では disk 成分の速度分散をパラメータ f を通して指定する形になっていたが（FDPS 5.0d 以前に付属するサンプルコードでは、 $f = 0.125$ ）、最新のリリースでは Toomore Q value の最小値 $Q_{T,\min}$ を通じて指定する方式になっている。

4. ディレクトリ `magi_data` に移動し、以下のコマンドを実行：

```
$ ./sh/run.sh
```

5. MAGI が正しく終了しているなら、`magi_data/dat` 以下に、拡張子が `tipsy` の粒子データが生成されているはずである。

データをダウンロードする場合 以下のサイトからダウンロードし、`./magi_data/dat/` 以下に置く。各粒子データの銀河モデルはすべてデフォルトモデルで、粒子数だけ異なる。

- $N = 2^{21}$: https://v2.jmlab.jp/owncloud/index.php/s/XnzbW5XAYwfqZYQ/download?path=%2Fmagi_data%2FGalaxy%2F21&files=Galaxy.tipsy
- $N = 2^{22}$: https://v2.jmlab.jp/owncloud/index.php/s/XnzbW5XAYwfqZYQ/download?path=%2Fmagi_data%2FGalaxy%2F22&files=Galaxy.tipsy
- $N = 2^{23}$: https://v2.jmlab.jp/owncloud/index.php/s/XnzbW5XAYwfqZYQ/download?path=%2Fmagi_data%2FGalaxy%2F23&files=Galaxy.tipsy
- $N = 2^{24}$: https://v2.jmlab.jp/owncloud/index.php/s/XnzbW5XAYwfqZYQ/download?path=%2Fmagi_data%2FGalaxy%2F24&files=Galaxy.tipsy

7.1.1.5 make の実行

`make` コマンドを実行する。

7.1.1.6 実行

実行方法は以下の通りである。

- MPI を使用しない場合、コマンドライン上で以下のコマンドを実行する

```
$ ./nbodysph.out
```

- MPI を使用する場合、コマンドライン上で以下のコマンドを実行する

```
$ MPIRUN -np NPROC ./nbodysph.out
```

ここで、`MPIRUN` には `mpirun` や `mpiexec` などが、`NPROC` には使用する MPI プロセスの数が入る。

7.1.1.7 結果の解析

ディレクトリ `result` に N 体粒子と SPH 粒子の粒子データファイル “`nbody0000x-proc0000y.dat`” と “`sph0000x-proc0000y.dat`” が出力される。ここで `x` は時刻に対応する整数、`y` は MPI のプロセス番号(ランク番号)を表す。 N 体粒子データの出力フォーマットは、1列目から順に粒子の ID、粒子の質量、位置の `x`, `y`, `z` 座標、粒子の `x`, `y`, `z` 軸方向の速度となっている。一方、SPH 粒子データの出力フォーマットは、1列目から順に粒子の ID、粒子の質量、位置の

x, y, z 座標、粒子の x, y, z 軸方向の速度、密度、単位質量あたりの内部エネルギー、エントロピー、圧力となっている。

図 4 は、 N 体粒子数 2^{21} 、SPH 粒子数 2^{18} で円盤銀河のシミュレーションを行ったときの $T = 0.46$ における星分布とガス分布である。

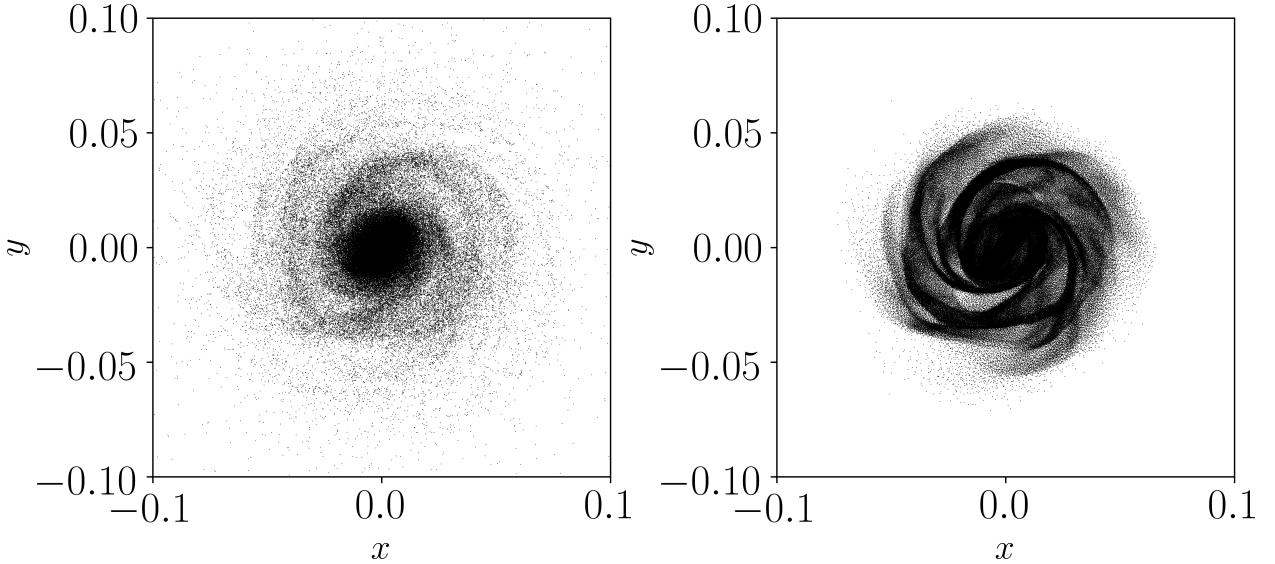


図 4: $T = 0.46$ における星分布 (左) とガス分布 (右) (計算は以下の条件で実施した: N 体粒子数 2^{21} 、SPH 粒子数 2^{18} 、等温、ガス温度 10^4 K、平均分子量 $\mu = 0.5$)

以下では、まず Springel の方法について解説し、その後、サンプルコードの実装について説明していく。

7.1.2 Springel の方法

Springel & Hernquist [2002, MNRAS, 333, 649] では、smoothing length が可変な場合でも、系のエネルギーとエントロピーが保存するようなスキーム (具体的には運動方程式) を定式化した。以下、彼らの定式化を手短に説明する。導出方針としては、smoothing length も独立変数とみて系の Lagrangian を立て、それを粒子数個の拘束条件の下、Euler-Lagrange 方程式を解く、というものである。

具体的には、彼らは系の Lagrangian として次のようなもの選んだ:

$$L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \dot{\mathbf{r}}_i^2 - \frac{1}{\gamma - 1} \sum_{i=1}^N m_i A_i \rho_i^{\gamma-1} \quad (7)$$

ここで、 $\mathbf{q} = (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, h_1, \dots, h_N)$ であり、下付きの整数はすべて粒子番号を表す。 \mathbf{r}_i は位置、 h_i は smoothing length、 m_i は質量、 γ は比熱比、 ρ_i は密度、 A_i はエントロピー関数と呼ばれ、単位質量あたりの内部エネルギー u_i と次の関係がある:

$$u_i = \frac{A_i}{\gamma - 1} \rho_i^{\gamma-1} \quad (8)$$

式(7)の第1項目は運動エネルギー、第2項目は内部エネルギーを表す。このLagrangianをそのままEuler-Lagrangian方程式を使って解くと、 $4N$ 個の方程式になってしまふので、彼らは次の N 個の拘束条件を導入した。

$$\phi_i = \frac{4\pi}{3} h_i^3 \rho_i - \bar{m} N_{\text{neigh}} = 0 \quad (9)$$

ここで、 \bar{m} はSPH粒子の平均質量^{注6)}、 N_{neigh} は近傍粒子数(定数)である。この拘束条件の下、Lagrangeの未定乗数法を使って、Euler-Lagrange方程式をとけば、以下の運動方程式が得られる:

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = - \sum_{j=1}^N m_j \left[f_i \frac{P_i}{\rho_i^2} \nabla_i W(r_{ij}, h_i) + f_j \frac{P_j}{\rho_j^2} \nabla_i W(r_{ij}, h_j) \right] \quad (10)$$

ここで、 P_i は圧力、 $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ 、 W はカーネル関数、 f_i は ∇h termと呼ばれる量で、

$$f_i = \left(1 + \frac{h_i}{3\rho_i} \frac{\partial \rho_i}{\partial h_i} \right)^{-1} \quad (11)$$

と定義される。

系の熱力学的状態はエントロピー A_i を独立変数として記述される。断熱過程の場合、エントロピーは衝撃波以外のところでは流れに沿って一定である。Springel [2005, MNRAS, 364, 1105]では、衝撃波でのエントロピー増加と速度の変化を人工粘性を使って次のようにモデル化している:

$$\frac{dA_i}{dt} = \frac{1}{2} \frac{\gamma - 1}{\rho_i^{\gamma-1}} \sum_{j=1}^N m_j \Pi_{ij} \mathbf{v}_{ij} \cdot \nabla_i \bar{W}_{ij} \quad (12)$$

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} \Big|_{\text{visc}} = - \sum_{j=1}^N m_j \Pi_{ij} \nabla_i \bar{W}_{ij} \quad (13)$$

ここで、 $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$ 、 \mathbf{v}_i は速度、 $\bar{W}_{ij} = \frac{1}{2}(W(r_{ij}, h_i) + W(r_{ij}, h_j))$ である。 Π_{ij} に関しては、原論文を参照して頂きたい。

したがって、SPH計算の手順は次のようになる:

(1) 式(9)と以下の式を無矛盾に解き、密度 ρ_i と h_i を決定する。

$$\rho_i = \sum_{j=1}^N m_j W(r_{ij}, h_i) \quad (14)$$

(2) 式(11)で定義される ∇h termを計算する。

(3) 式(10)、(12)、(13)の右辺を計算する。

(4) SPH粒子の位置、速度、エントロピーを時間積分する。

以下、まずユーザ定義クラスと相互作用関数の実装について解説を行い、次にメインルーチンの実装について解説を行う。複数粒子種の取扱いは後者で解説する。

^{注6)}拘束条件に使用していることから、定数扱いであることに注意。

7.1.3 ユーザー定義型

本サンプルコードのユーザ定義型はすべて `user_defined.F90` に定義されている。はじめに用意されているユーザ定義型の種類について簡単に説明しておく。冒頭で述べたように、本サンプルコードは 2 種類の粒子 (N 体粒子, SPH 粒子) を扱う。そのため、`FullParticle` 型も 2 種類用意している (N 体粒子用に 派生データ型 `fp_nbody` を、SPH 粒子用に 派生データ型 `fp_sph`)。相互作用は重力相互作用と流体相互作用の 2 種類ある。そのため、`Force` 型を 3 種類用意している (重力計算用に 派生データ型 `force_grav` を、密度計算用に 派生データ型 `force_dens` を、そして、圧力勾配による加速度 (以下、単に圧力勾配加速度) の計算用に 派生データ型 `force_hydro` を; 第 4 節も参照のこと)。本サンプルコードでは、簡単のため、`EssentialParticleI` 型と `EssentialParticleJ` 型を 1 つの派生データ型で兼ねることにし (以下、単に `EssentialParticle` 型)、密度計算と圧力勾配加速度計算に同じ `EssentialParticle` 型を使用する。したがって、`EssentialParticle` 型の種類は 2 種類となっている (重力計算用に 派生データ型 `ep_grav` を、SPH 計算用に 派生データ型 `ep_hydro`)。

以下、各ユーザ定義型の実装について説明する。

7.1.3.1 `FullParticle` 型

まず、 N 体粒子用の `FullParticle` 型である 派生データ型 `fp_nbody` について解説する。この派生データ型には、 N 体粒子が持っているべき全ての物理量が含まれている。Listing 52 に、この派生データ型の実装を示す。メンバ変数 の構成は、第 3-4 節で紹介した N 体計算サンプルコードとほぼ同じであり、詳細はそちらを参照されたい。

Listing 52: `FullParticle` 型 (派生データ型 `fp_nbody`)

```

1 !*** Full particle type
2 type, public, bind(c) :: fp_nbody !$fdps FP
3   !$fdps copyFromForce force_grav (acc,acc) (pot,pot)
4   integer(kind=c_long_long) :: id !$fdps id
5   real(kind=c_double) :: mass !$fdps charge
6   type(fdps_f64vec) :: pos !$fdps position
7   type(fdps_f64vec) :: vel
8   type(fdps_f64vec) :: acc
9   real(kind=c_double) :: pot
10  end type fp_nbody

```

次に、SPH 粒子用の `FullParticle` 型である 派生データ型 `fp_sph` について解説する。この派生データ型には、SPH 粒子が持っているべき全ての物理量が含まれている。Listing 53 に、この派生データ型の実装を示す。メンバ変数の内、主要な変数の意味は次の通りである: `id` (識別番号)、`mass` (質量)、`pos` (位置 $[r_i]$)、`vel` (速度 $[v_i]$)、`acc_grav` (重力加速度)、`pot_grav` (重力ポテンシャル)、`acc_hydro` (圧力勾配加速度)、`dens` (密度 $[\rho_i]$)、`eng` (単位質量あたりの内部エネルギー $[u_i]$)、`ent` (エントロピー関数 [以下、単にエントロピー] $[A_i]$)、`pres` (圧力 $[P_i]$)、`smth` (smoothing length^{注 7)} $[h_i]$)、`gradh` (∇h term $[f_i]$)、`divv` ($(\nabla \cdot v)_i$ 、ここで下付きの i は粒子 i の位置での微分を示している)、`rotv` ($(\nabla \times v)_i$)、`balsw` (Balsara switch のた

^{注 7)} カーネル関数が 0 になる距離と定義。

めの係数で、定義式は Balsara [1995, JCP, 121, 357] の $f(a)$)、`snls` (音速)、`eng_dot` (`eng` の時間変化率)、`ent_dot` (`ent` の時間変化率)、`dt` (この粒子の軌道を時間積分するときに許される最大の時間刻み幅)。

以下の点に注意して頂きたい。

- SPH 粒子が関わる相互作用計算は、重力計算、密度計算、圧力勾配加速度計算の 3 種類があるので、それに応じて `copyFromForce` 指示文も 3 つ用意されている。

Listing 53: FullParticle 型 (派生データ型 `fp_sph`)

```

1 type, public, bind(c) :: fp_sph !$fdps FP
2   !$fdps copyFromForce force_grav (acc,acc_grav) (pot,pot_grav)
3   !$fdps copyFromForce force_dens (flag,flag) (dens,dens) (smth,smth)
4     (gradh,gradh) (divv,divv) (rotv,rotv)
5   !$fdps copyFromForce force_hydro (acc,acc_hydro) (eng_dot,eng_dot) (
6     ent_dot,ent_dot) (dt,dt)
7   integer(kind=c_long_long) :: id !$fdps id
8   real(kind=c_double) :: mass !$fdps charge
9   type(fdps_f64vec) :: pos !$fdps position
10  type(fdps_f64vec) :: vel
11  type(fdps_f64vec) :: acc_grav
12  real(kind=c_double) :: pot_grav
13  type(fdps_f64vec) :: acc_hydro
14  integer(kind=c_int) :: flag
15  real(kind=c_double) :: dens
16  real(kind=c_double) :: eng
17  real(kind=c_double) :: ent
18  real(kind=c_double) :: pres
19  real(kind=c_double) :: smth
20  real(kind=c_double) :: gradh
21  real(kind=c_double) :: divv
22  type(fdps_f64vec) :: rotv
23  real(kind=c_double) :: balsw
24  real(kind=c_double) :: snls
25  real(kind=c_double) :: eng_dot
26  real(kind=c_double) :: ent_dot
27  real(kind=c_double) :: dt
28  type(fdps_f64vec) :: vel_half
29  real(kind=c_double) :: eng_half
    real(kind=c_double) :: ent_half
end type fp_sph

```

7.1.3.2 EssentialParticle 型

まず、重力計算用の `EssentialParticle` 型である 派生データ型 `ep_grav` について解説する。この派生データ型には、重力計算を行う際、 i 粒子と j 粒子が持っているべき全ての物理量をメンバ変数として持たせている。Listing 54 に、この派生データ型の実装を示す。ユーザは `EssentialParticle` 型の定義部に、`FullParticle` 型からのデータコピーの方法を指示するため指示文 (`copyFromFP` 指示文) を書く必要があるが、本サンプルコードでは粒子種が 2 種類のため、2 つの `copyFromFP` 指示文が実装されていることに注意されたい。

Listing 54: EssentialParticle 型 (派生データ型 ep_grav)

```

1 type, public, bind(c) :: ep_grav !$fdps EPI,EPJ
2   !$fdps copyFromFP fp_nbody (id,id) (mass,mass) (pos,pos)
3   !$fdps copyFromFP fp_sph (id,id) (mass,mass) (pos,pos)
4   integer(kind=c_long_long) :: id !$fdps id
5   real(kind=c_double) :: mass !$fdps charge
6   type(fdps_f64vec) :: pos !$fdps position
7 end type ep_grav

```

次に、密度計算と圧力勾配加速度計算用の EssentialParticle 型である 派生データ型 ep_hydro について解説する。この派生データ型には、密度計算と圧力勾配加速度計算を行う際、 i 粒子と j 粒子が持つべき全ての物理量をメンバ変数として持たせている。Listing 55 に、この派生データ型の実装を示す。

Listing 55: EssentialParticle 型 (派生データ型 ep_hydro)

```

1 type, public, bind(c) :: ep_hydro !$fdps EPI,EPJ
2   !$fdps copyFromFP fp_sph (id,id) (pos,pos) (vel,vel) (mass,mass) (
3     smth,smth) (dens,dens) (pres,pres) (gradh,gradh) (sns,snds) (
4     balsw,balsw)
5   integer(kind=c_long_long) :: id !$fdps id
6   type(fdps_f64vec) :: pos !$fdps position
7   type(fdps_f64vec) :: vel
8   real(kind=c_double) :: mass !$fdps charge
9   real(kind=c_double) :: smth !$fdps rsearch
10  real(kind=c_double) :: dens
11  real(kind=c_double) :: pres
12  real(kind=c_double) :: gradh
13  real(kind=c_double) :: sns
14  real(kind=c_double) :: balsw
15 end type ep_hydro

```

7.1.3.3 Force 型

まず、重力計算用の Force 型である 派生データ型 force_grav について解説する。この派生データ型は、重力計算を行った際にその結果として得られる全ての物理量をメンバ変数として持っている必要がある。Listing 56 にこの派生データ型の実装を示す。

Listing 56: Force 型 (派生データ型 force_grav)

```

1 type, public, bind(c) :: force_grav !$fdps Force
2   !$fdps clear
3   type(fdps_f64vec) :: acc
4   real(kind=c_double) :: pot
5 end type force_grav

```

次に、密度計算用の Force 型である 派生データ型 force_dens について解説する。この派生データ型は、密度計算を行った際にその結果として得られる全ての物理量をメンバ変数として持っている必要がある。Listing 57 に、この派生データ型の実装を示す。本サンプルコードの SPH 法では、smoothing length は固定ではなく、密度に応じて変化する。そのため、メンバ変数として smth を持つ。また、密度計算と同時に、 ∇h term および $(\nabla \cdot v)_i$ 、 $(\nabla \times v)_i$

の計算を同時行うため、メンバ変数に gradh, divv, rotv を持つ。メンバ変数 flag は ρ_i と h_i を決定するイテレーション計算が収束したかどうかの結果を格納する変数である（詳細は、相互作用関数の節を参照のこと）。

Listing 57: Force 型 (派生データ型 force_dens)

```

1 type, public, bind(c) :: force_dens !$fdps Force
2   !$fdps clear smth=keep
3   integer(kind=c_int) :: flag
4   real(kind=c_double) :: dens
5   real(kind=c_double) :: smth
6   real(kind=c_double) :: gradh
7   real(kind=c_double) :: divv
8   type(fdps_f64vec) :: rotv
9 end type force_dens

```

最後に、圧力勾配加速度計算用の Force 型である 派生データ型 force_hydro について解説する。この派生データ型は、圧力勾配加速度計算を行った際にその結果として得られる全ての物理量をメンバ変数として持っている必要がある。Listing 58 に、この派生データ型の実装を示す。

Listing 58: Force 型 (派生データ型 force_hydro)

```

1 type, public, bind(c) :: force_hydro !$fdps Force
2   !$fdps clear
3   type(fdps_f64vec) :: acc
4   real(kind=c_double) :: eng_dot
5   real(kind=c_double) :: ent_dot
6   real(kind=c_double) :: dt
7 end type force_hydro

```

7.1.4 相互作用関数

本サンプルコードで使用する相互作用関数はすべて user_defined.F90 に実装されている。全部で 4 種類あり、重力計算（粒子間相互作用及び粒子-超粒子間相互作用）、密度計算、圧力勾配加速度計算に使用される。以下、順に説明していく。

7.1.4.1 重力計算

重力計算用の相互作用関数は サブルーチン calc_gravity_ep_ep 及び calc_gravity_ep_sp として実装されている。Listing 59 にこれらの実装を示す。実装は第 3-4 節で紹介した N 体計算サンプルコードのものとほぼ同じであり、詳細はそちらを参照されたい。

Listing 59: 相互作用関数 (重力計算用)

```

1 #if defined(ENABLE_PHANTOM_GRAPE_X86)
2   subroutine calc_gravity_ep_ep(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
3 #if defined(PARTICLE_SIMULATOR_THREAD_PARALLEL) && defined(_OPENMP)
4   use omp_lib
5 #endif

```

```

6      use phantom_grape_g5_x86
7      implicit none
8      integer(c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
9      type(ep_grav), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
10     type(ep_grav), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
11     type(force_grav), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
12     !* Local variables
13     integer(c_int) :: i,j
14     integer(c_int) :: npipe,njpipe,devid
15     real(c_double), dimension(3,n_ip) :: xi,ai
16     real(c_double), dimension(n_ip) :: pi
17     real(c_double), dimension(3,n_jp) :: xj
18     real(c_double), dimension(n_jp) :: mj
19
20     npipe = n_ip
21     njpipe = n_jp
22     do i=1,n_ip
23         xi(1,i) = ep_i(i)%pos%x
24         xi(2,i) = ep_i(i)%pos%y
25         xi(3,i) = ep_i(i)%pos%z
26         ai(1,i) = 0.0d0
27         ai(2,i) = 0.0d0
28         ai(3,i) = 0.0d0
29         pi(i)   = 0.0d0
30     end do
31     do j=1,n_jp
32         xj(1,j) = ep_j(j)%pos%x
33         xj(2,j) = ep_j(j)%pos%y
34         xj(3,j) = ep_j(j)%pos%z
35         mj(j)   = ep_j(j)%mass
36     end do
37 #if defined(PARTICLE_SIMULATOR_THREAD_PARALLEL) && defined(_OPENMP)
38     devid = omp_get_thread_num()
39     ! [IMPORTANT NOTE]
40     !   The subroutine calc_gravity_ep_ep is called by a OpenMP thread
41     !   in the FDPS. This means that here is already in the parallel
42     !   region.
43     !   So, you can use omp_get_thread_num() without !$OMP parallel
44     !   directives.
45     !   If you use them, a nested parallel regions is made and the
46     !   gravity
47     !   calculation will not be performed correctly.
48 #else
49     devid = 0
50 #endif
51     call g5_set_xmjMC(devid, 0, n_jp, xj, mj)
52     call g5_set_nMC(devid, n_jp)
53     call g5_calculate_force_on_xMC(devid, xi, ai, pi, n_ip)
54     do i=1,n_ip
55         f(i)%acc%x = f(i)%acc%x + ai(1,i)
56         f(i)%acc%y = f(i)%acc%y + ai(2,i)
57         f(i)%acc%z = f(i)%acc%z + ai(3,i)
58         f(i)%pot   = f(i)%pot   - pi(i)
59     end do
60 end subroutine calc_gravity_ep_ep

```

```

58
59     subroutine calc_gravity_ep_sp(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
60 #if defined(PARTICLE_SIMULATOR_THREAD_PARALLEL) && defined(_OPENMP)
61     use omp_lib
62 #endif
63     use phantom_grape_g5_x86
64     implicit none
65     integer(c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
66     type(ep_grav), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
67     type(fdps_spj_monopole), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
68     type(force_grav), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
69     !* Local variables
70     integer(c_int) :: i,j
71     integer(c_int) :: npipe,npjpipe,devid
72     real(c_double), dimension(3,n_ip) :: xi,ai
73     real(c_double), dimension(n_ip) :: pi
74     real(c_double), dimension(3,n_jp) :: xj
75     real(c_double), dimension(n_jp) :: mj
76
77     npipe = n_ip
78     npjpipe = n_jp
79     do i=1,n_ip
80         xi(1,i) = ep_i(i)%pos%x
81         xi(2,i) = ep_i(i)%pos%y
82         xi(3,i) = ep_i(i)%pos%z
83         ai(1,i) = 0.0d0
84         ai(2,i) = 0.0d0
85         ai(3,i) = 0.0d0
86         pi(i)   = 0.0d0
87     end do
88     do j=1,n_jp
89         xj(1,j) = ep_j(j)%pos%x
90         xj(2,j) = ep_j(j)%pos%y
91         xj(3,j) = ep_j(j)%pos%z
92         mj(j)   = ep_j(j)%mass
93     end do
94 #if defined(PARTICLE_SIMULATOR_THREAD_PARALLEL) && defined(_OPENMP)
95     devid = omp_get_thread_num()
96     ! [IMPORTANT NOTE]
97     !   The subroutine calc_gravity_ep_sp is called by a OpenMP thread
98     !   in the FDPS. This means that here is already in the parallel
99     !   region.
100    !   So, you can use omp_get_thread_num() without !$OMP parallel
101    !   directives.
102    !   If you use them, a nested parallel regions is made and the
103    !   gravity
104    !   calculation will not be performed correctly.
105 #else
106     devid = 0
107 #endif
108     call g5_set_xmjMC(devid, 0, n_jp, xj, mj)
109     call g5_set_nMC(devid, n_jp)
110     call g5_calculate_force_on_xMC(devid, xi, ai, pi, n_ip)
111     do i=1,n_ip
112         f(i)%acc%x = f(i)%acc%x + ai(1,i)

```

```

110      f(i)%acc%y = f(i)%acc%y + ai(2,i)
111      f(i)%acc%z = f(i)%acc%z + ai(3,i)
112      f(i)%pot   = f(i)%pot   - pi(i)
113    end do
114  end subroutine calc_gravity_ep_sp
115 #else
116  subroutine calc_gravity_ep_ep(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
117    integer(kind=c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
118    type(ep_grav), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
119    type(ep_grav), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
120    type(force_grav), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
121    !* Local variables
122    integer(kind=c_int) :: i,j
123    real(kind=c_double) :: eps2,poti,r3_inv,r_inv
124    type(fdps_f64vec) :: xi,ai,rij
125    !* Compute force
126    eps2 = eps_grav * eps_grav
127    do i=1,n_ip
128      xi%x = ep_i(i)%pos%x
129      xi%y = ep_i(i)%pos%y
130      xi%z = ep_i(i)%pos%z
131      ai%x = 0.0d0
132      ai%y = 0.0d0
133      ai%z = 0.0d0
134      poti = 0.0d0
135      do j=1,n_jp
136        rij%x = xi%x - ep_j(j)%pos%x
137        rij%y = xi%y - ep_j(j)%pos%y
138        rij%z = xi%z - ep_j(j)%pos%z
139        r3_inv = rij%x*rij%x +
140                  + rij%y*rij%y +
141                  + rij%z*rij%z +
142                  + eps2
143        r_inv = 1.0d0/dsqrt(r3_inv)
144        r3_inv = r_inv * r_inv
145        r_inv = r_inv * ep_j(j)%mass
146        r3_inv = r3_inv * r_inv
147        ai%x = ai%x - r3_inv * rij%x
148        ai%y = ai%y - r3_inv * rij%y
149        ai%z = ai%z - r3_inv * rij%z
150        poti = poti - r_inv
151      end do
152      f(i)%acc%x = f(i)%acc%x + ai%x
153      f(i)%acc%y = f(i)%acc%y + ai%y
154      f(i)%acc%z = f(i)%acc%z + ai%z
155      f(i)%pot   = f(i)%pot   + poti
156    end do
157  end subroutine calc_gravity_ep_ep
158
159  subroutine calc_gravity_ep_sp(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
160    integer(kind=c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
161    type(ep_grav), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
162    type(fdps_spj_monopole), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
163    type(force_grav), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
164    !* Local variables

```

```

165      integer(kind=c_int) :: i,j
166      real(kind=c_double) :: eps2,poti,r3_inv,r_inv
167      type(fdps_f64vec) :: xi,ai,rij
168      !* Compute force
169      eps2 = eps_grav * eps_grav
170      do i=1,n_ip
171          xi%x = ep_i(i)%pos%x
172          xi%y = ep_i(i)%pos%y
173          xi%z = ep_i(i)%pos%z
174          ai%x = 0.0d0
175          ai%y = 0.0d0
176          ai%z = 0.0d0
177          poti = 0.0d0
178          do j=1,n_jp
179              rij%x = xi%x - ep_j(j)%pos%x
180              rij%y = xi%y - ep_j(j)%pos%y
181              rij%z = xi%z - ep_j(j)%pos%z
182              r3_inv = rij%x*rij%x +
183                      + rij%y*rij%y +
184                      + rij%z*rij%z +
185                      + eps2
186              r_inv = 1.0d0/dsqrt(r3_inv)
187              r3_inv = r_inv * r_inv
188              r_inv = r_inv * ep_j(j)%mass
189              r3_inv = r3_inv * r_inv
190              ai%x = ai%x - r3_inv * rij%x
191              ai%y = ai%y - r3_inv * rij%y
192              ai%z = ai%z - r3_inv * rij%z
193              poti = poti - r_inv
194          end do
195          f(i)%acc%x = f(i)%acc%x + ai%x
196          f(i)%acc%y = f(i)%acc%y + ai%y
197          f(i)%acc%z = f(i)%acc%z + ai%z
198          f(i)%pot = f(i)%pot + poti
199      end do
200  end subroutine calc_gravity_ep_sp
201 #endif

```

7.1.4.2 密度計算

密度計算用の相互作用関数はサブルーチン `calc_density` として実装されている。Listing 60 に、実装を示す。実装はマクロ `ENABLE_VARIABLE_SMOOTHING_LENGTH` が定義されているか否かで分かれる。このマクロが未定義の場合には、固定長カーネルコードとなり、実装は第 3-4 節で紹介した SPH サンプルコードとほぼ同じであるので、そちらを参照されたい。以下、このマクロが定義されている場合の実装について解説する。

第 7.1.2 節で説明したように、密度 ρ_i と smoothing length h_i は式 (14) と式 (9) を無矛盾に解いて決定する必要がある。これには 2 つの方程式を反復的に解く必要がある。このイテレーションを無限 `do-enddo` ループの中で行っている。本サンプルコードでは ρ_i と h_i の計算を効率的に行うため、smoothing length の値を定数 `scf_smth` 倍してから密度計算を実行している。このため、定数倍する前の smoothing length の値を $h_{i,0}$ とすると、このイテレー

ションの間に h_i を 0 から $h_{\max,\text{alw}} \equiv \text{scf_smth} \times h_{i,0}$ までの間なら変化させてもよいことになる。なぜなら、 j 粒子リストの取りこぼしは発生しないからである。逆にこの範囲でイテレーションが収束しなければ、求めたい h_i は $h_{\max,\text{alw}}$ よりも大きいということになり、既存の j 粒子リストでは ρ_i と h_i を決定できないということになる。この場合、 $h_{i,0}$ を大きくした上で、密度計算をやり直す必要がある。この外側のイテレーションは f_main.F90 のサブルーチン calc_density_wrapper で行われている。このサブルーチンの詳細は第 7.1.5 節で行う。

無限 do-enddo ループの後には、 ∇h term の計算、 $(\nabla \cdot \mathbf{v})_i$ 及び $(\nabla \times \mathbf{v})_i$ の計算を行っている。

Listing 60: 相互作用関数 (密度計算用)

```

1 subroutine calc_density(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
2     integer(kind=c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
3     type(ep_hydro), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
4     type(ep_hydro), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
5     type(force_dens), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
6     !* Local parameters
7     real(kind=c_double), parameter :: eps=1.0d-6
8     !* Local variables
9     integer(kind=c_int) :: i,j
10    integer(kind=c_int) :: n_unchanged
11    real(kind=c_double) :: M,M_trgt
12    real(kind=c_double) :: dens,drho_dh
13    real(kind=c_double) :: h,h_max_alw,h_L,h_U,dh,dh_prev
14    type(fdps_f64vec) :: dr,dv,gradW_i
15
16 #if defined(ENABLE_VARIABLE_SMOOTHING_LENGTH)
17     real(kind=c_double), dimension(n_jp) :: mj,rij
18     M_trgt = mass_avg * N_neighbor
19     do i=1,n_ip
20         dens = 0.0d0
21         h_max_alw = ep_i(i)%smth ! maximum allowance
22         h = h_max_alw / SCF_smth
23         ! Note that we increase smth by a factor of scf_smth
24         ! before calling calc_density().
25         h_L = 0.0d0
26         h_U = h_max_alw
27         dh_prev = 0.0d0
28         n_unchanged = 0
29         ! Software cache
30         do j=1,n_jp
31             mj(j) = ep_j(j)%mass
32             dr%x = ep_i(i)%pos%x - ep_j(j)%pos%x
33             dr%y = ep_i(i)%pos%y - ep_j(j)%pos%y
34             dr%z = ep_i(i)%pos%z - ep_j(j)%pos%z
35             rij(j) = dsqrt(dr%x * dr%x &
36                           +dr%y * dr%y &
37                           +dr%z * dr%z)
38         end do
39         iteration_loop: do
40             ! Calculate density
41             dens = 0.0d0

```

```

42      do j=1,n_jp
43        dens = dens + mj(j) * W(rij(j), h)
44      end do
45      ! Check if the current value of the smoohting length
46      ! satisfies
47      ! Eq.(5) in Springel (2005).
48      M = 4.0d0 * pi * h * h * h * dens / 3.0d0
49      if ((h < h_max_alw) .and. (dabs(M/M_trgt - 1.0d0) < eps))
50        then
51          ! In this case, Eq.(5) holds within a specified accuracy
52          .
53          f(i)%flag = 1
54          f(i)%dens = dens
55          f(i)%smth = h
56          exit iteration_loop
57      end if
58      if (((h == h_max_alw) .and. (M < M_trgt)) .or. (n_unchanged
59          == 4)) then
60        ! In this case, we skip this particle forcibly.
61        ! In order to determine consistently the density
62        ! and the smoohting length for this particle,
63        ! we must re-perform calcForceAllAndWriteBack().
64        f(i)%flag = 0
65        f(i)%dens = dens
66        f(i)%smth = h_max_alw
67        exit iteration_loop
68      end if
69      ! Update h_L & h_U
70      if (M < M_trgt) then
71        if (h_L < h) h_L = h
72      else if (M_trgt < M) then
73        if (h < h_U) h_U = h
74      end if
75      dh = h_U - h_L
76      if (dh == dh_prev) then
77        n_unchanged = n_unchanged + 1
78      else
79        dh_prev = dh
80        n_unchanged = 0
81      end if
82      ! Update smoothing length
83      h = ((3.0d0 * M_trgt)/(4.0d0 * pi * dens))**((1.0d0/3.0d0)
84      if ((h <= h_L) .or. (h == h_U)) then
85        ! In this case, we switch to the bisection search.
86        ! The inclusion of '=' in the if statement is very
87        ! important to escape a limit cycle.
88        h = 0.5d0 * (h_L + h_U)
89      else if (h_U < h) then
90        h = h_U
91      end if
92    end do iteration_loop
93    ! Calculate grad-h term
94    if (f(i)%flag == 1) then
95      drho_dh = 0.0d0
96      do j=1,n_jp

```

```

93         drho_dh = drho_dh + mj(j) * dWdh(rij(j), h)
94     end do
95     f(i)%gradh = 1.0d0 / (1.0d0 + (h * drho_dh) / (3.0d0 * dens)
96     )
97     else
98         f(i)%gradh = 1.0d0 ! dummy value
99     end if
100    ! Compute \div v & \rot v for Balsara switch
101 #if defined(USE_BALSARA_SWITCH)
102     do j=1,n_jp
103         dr%x = ep_i(i)%pos%x - ep_j(j)%pos%x
104         dr%y = ep_i(i)%pos%y - ep_j(j)%pos%y
105         dr%z = ep_i(i)%pos%z - ep_j(j)%pos%z
106         dv%x = ep_i(i)%vel%x - ep_j(j)%vel%x
107         dv%y = ep_i(i)%vel%y - ep_j(j)%vel%y
108         dv%z = ep_i(i)%vel%z - ep_j(j)%vel%z
109         gradW_i = gradW(dr, f(i)%smth)
110         f(i)%divv = f(i)%divv - mj(j) * (dv%x * gradW_i%x +
111                                         +dv%y * gradW_i%y +
112                                         +dv%z * gradW_i%z)
113         f(i)%rotv%x = f(i)%rotv%x - mj(j) * (dv%y * gradW_i%z - dv%z
114                                         * gradW_i%y)
115         f(i)%rotv%y = f(i)%rotv%y - mj(j) * (dv%z * gradW_i%x - dv%x
116                                         * gradW_i%z)
117         f(i)%rotv%z = f(i)%rotv%z - mj(j) * (dv%x * gradW_i%y - dv%y
118                                         * gradW_i%x)
119     end do
120     f(i)%divv = f(i)%divv / f(i)%dens
121     f(i)%rotv%x = f(i)%rotv%x / f(i)%dens
122     f(i)%rotv%y = f(i)%rotv%y / f(i)%dens
123     f(i)%rotv%z = f(i)%rotv%z / f(i)%dens
124 #endif
125     end do
126 #else
127     double precision :: mj,rij
128     do i=1,n_ip
129         f(i)%dens = 0.0d0
130         do j=1,n_jp
131             dr%x = ep_j(j)%pos%x - ep_i(i)%pos%x
132             dr%y = ep_j(j)%pos%y - ep_i(i)%pos%y
133             dr%z = ep_j(j)%pos%z - ep_i(i)%pos%z
134             rij = dsqrt(dr%x * dr%x +
135                           +dr%y * dr%y +
136                           +dr%z * dr%z)
137             f(i)%dens = f(i)%dens +
138                         + ep_j(j)%mass * W(rij,ep_i(i)%smth)
139         end do
140         f(i)%smth = ep_i(i)%smth
141         f(i)%gradh = 1.0d0
142         ! Compute \div v & \rot v for Balsara switch
143 #if defined(USE_BALSARA_SWITCH)
144         do j=1,n_jp
145             mj = ep_j(j)%mass
146             dr%x = ep_i(i)%pos%x - ep_j(j)%pos%x
147             dr%y = ep_i(i)%pos%y - ep_j(j)%pos%y

```

```

144      dr%z = ep_i(i)%pos%z - ep_j(j)%pos%z
145      dv%x = ep_i(i)%vel%x - ep_j(j)%vel%x
146      dv%y = ep_i(i)%vel%y - ep_j(j)%vel%y
147      dv%z = ep_i(i)%vel%z - ep_j(j)%vel%z
148      gradW_i = gradW(dr, f(i)%smth)
149      f(i)%divv = f(i)%divv - mj * (dv%x * gradW_i%x &
150                                         + dv%y * gradW_i%y &
151                                         + dv%z * gradW_i%z)
152      f(i)%rotv%x = f(i)%rotv%x - mj * (dv%y * gradW_i%z - dv%z *
153                                         gradW_i%y)
154      f(i)%rotv%y = f(i)%rotv%y - mj * (dv%z * gradW_i%x - dv%x *
155                                         gradW_i%z)
156      f(i)%rotv%z = f(i)%rotv%z - mj * (dv%x * gradW_i%y - dv%y *
157                                         gradW_i%x)
158      end do
159      f(i)%divv = f(i)%divv / f(i)%dens
160      f(i)%rotv%x = f(i)%rotv%x / f(i)%dens
161      f(i)%rotv%y = f(i)%rotv%y / f(i)%dens
162      f(i)%rotv%z = f(i)%rotv%z / f(i)%dens
163 #endif
164     end do
165 #endif

```

7.1.4.3 圧力勾配加速度計算

圧力勾配加速度用の相互作用関数は サブルーチン calc_hydro_force として実装されている。Listing 61 に、実装を示す。このサブルーチンでは、式 (10)、(12)、(13) の右辺の計算、及び、Springel [2005, MNRAS, 364, 1105] の式 (16) に従って dt の計算を行っている (dt については 派生データ型 fp_sph の説明を参照のこと)。

Listing 61: 相互作用関数 (圧力勾配加速度計算用)

```

1 **** Interaction function
2 subroutine calc_hydro_force(ep_i,n_ip,ep_j,n_jp,f) bind(c)
3   integer(kind=c_int), intent(in), value :: n_ip,n_jp
4   type(ep_hydro), dimension(n_ip), intent(in) :: ep_i
5   type(ep_hydro), dimension(n_jp), intent(in) :: ep_j
6   type(force_hydro), dimension(n_ip), intent(inout) :: f
7   !* Local variables
8   integer(kind=c_int) :: i,j
9   real(kind=c_double) :: mass_i,mass_j,smth_i,smth_j, &
10                  dens_i,dens_j,pres_i,pres_j, &
11                  gradh_i,gradh_j,balsw_i,balsw_j, &
12                  snds_i,snds_j
13   real(kind=c_double) :: povrho2_i,povrho2_j, &
14                  v_sig_max,dr_dv,w_ij,v_sig,AV
15   type(fdps_f64vec) :: pos_i,pos_j,vel_i,vel_j, &
16                  dr,dv,gradW_i,gradW_j,gradW_ij
17   do i=1,n_ip
18     !* Zero-clear
19     v_sig_max = 0.0d0
20     !* Extract i-particle info.
21     pos_i = ep_i(i)%pos

```

```

22      vel_i = ep_i(i)%vel
23      mass_i = ep_i(i)%mass
24      smth_i = ep_i(i)%smth
25      dens_i = ep_i(i)%dens
26      pres_i = ep_i(i)%pres
27      gradh_i = ep_i(i)%gradh
28      balsw_i = ep_i(i)%balsw
29      snds_i = ep_i(i)%snds
30      povrho2_i = pres_i/(dens_i*dens_i)
31      do j=1,n_jp
32          !* Extract j-particle info.
33          pos_j%x = ep_j(j)%pos%x
34          pos_j%y = ep_j(j)%pos%y
35          pos_j%z = ep_j(j)%pos%z
36          vel_j%x = ep_j(j)%vel%x
37          vel_j%y = ep_j(j)%vel%y
38          vel_j%z = ep_j(j)%vel%z
39          mass_j = ep_j(j)%mass
40          smth_j = ep_j(j)%smth
41          dens_j = ep_j(j)%dens
42          pres_j = ep_j(j)%pres
43          gradh_j = ep_j(j)%gradh
44          balsw_j = ep_j(j)%balsw
45          snds_j = ep_j(j)%snds
46          povrho2_j = pres_j/(dens_j*dens_j)
47          !* Compute dr & dv
48          dr%x = pos_i%x - pos_j%x
49          dr%y = pos_i%y - pos_j%y
50          dr%z = pos_i%z - pos_j%z
51          dv%x = vel_i%x - vel_j%x
52          dv%y = vel_i%y - vel_j%y
53          dv%z = vel_i%z - vel_j%z
54          !* Compute the signal velocity
55          dr_dv = dr%x * dv%x + dr%y * dv%y + dr%z * dv%z
56          if (dr_dv < 0.0d0) then
57              w_ij = dr_dv / sqrt(dr%x * dr%x + dr%y * dr%y + dr%z * dr%z
58                  )
59          else
60              w_ij = 0.0d0
61          end if
62          v_sig = snds_i + snds_j - 3.0d0 * w_ij
63          v_sig_max = max(v_sig_max, v_sig)
64          !* Compute the artificial viscosity
65          AV = - 0.5d0*v_sig*w_ij / (0.5d0*(dens_i+dens_j)) * 0.5d0*(
66              balsw_i+balsw_j)
67          !* Compute the average of the gradients of kernel
68          gradW_i = gradW(dr,smth_i)
69          gradW_j = gradW(dr,smth_j)
70          gradW_ij%x = 0.5d0 * (gradW_i%x + gradW_j%x)
71          gradW_ij%y = 0.5d0 * (gradW_i%y + gradW_j%y)
72          gradW_ij%z = 0.5d0 * (gradW_i%z + gradW_j%z)
73          !* Compute the acceleration and the heating rate
74          f(i)%acc%x = f(i)%acc%x - mass_j*(gradh_i * povrho2_i *
75              gradW_i%x &
76              + gradh_j * povrho2_j *
77

```

```

74                                     gradW_j%x &
75                                     +AV * gradW_ij%x)
76     f(i)%acc%y = f(i)%acc%y - mass_j*(gradh_i * povrho2_i *
77                                     gradW_i%y &
78                                     +gradh_j * povrho2_j *
79                                     gradW_j%y &
80                                     +AV * gradW_ij%y)
81     f(i)%acc%z = f(i)%acc%z - mass_j*(gradh_i * povrho2_i *
82                                     gradW_i%z &
83                                     +gradh_j * povrho2_j *
84                                     gradW_j%z &
85                                     +AV * gradW_ij%z)
86
87     f(i)%eng_dot = f(i)%eng_dot
88                                     &
89                                     + mass_j * gradh_i * povrho2_i * (dv%x * gradW_i%z
90                                     x &
91                                     +dv%y * gradW_i%y &
92                                     +dv%z * gradW_i%z) &
93                                     + mass_j * 0.5d0 * AV * (dv%x * gradW_ij%x
94                                     &
95                                     +dv%y * gradW_ij%y &
96                                     +dv%z * gradW_ij%z)
97
      end do
      f(i)%ent_dot = f(i)%ent_dot
      &
      * (specific_heat_ratio - 1.0d0) &
      / dens_i** (specific_heat_ratio - 1.0d0)
      f(i)%dt = CFL_hydro*2.0d0*smth_i/v_sig_max
    end do

```

7.1.5 プログラム本体

本節では、主に `f_main.F90` に実装されたサンプルコード本体について解説を行う。詳細な説明に入る前に、サンプルコードの内容と全体構造について説明を与える。[7.1](#) 節冒頭で述べたように、このサンプルコードでは円盤銀河の N 体/SPH シミュレーションを行うものであるが、初期条件としては円盤銀河の他、簡単なテスト計算用の初期条件も用意されている。具体的に以下の 4 つの場合に対応している：

- (a) 円盤銀河用の初期条件。この初期条件はコンパイルオプション時に `-DINITIAL_CONDITION=0` が指定された場合に選択される。初期条件作成は `ic.F90` のサブルーチン `galaxy_ic` で行われる。ダークマターと星の分布は事前に MAGI で作成されたファイルを読み込んで設定される。一方、ガスの初期分布はこのサブルーチン内部で生成される。デフォルトでは粒子数 2^{18} で exponential disk ($M = 10^{10} M_{\odot}$, $R_s = 7 \text{ kpc}$ [scale radius],

$R_t = 12.5$ kpc [truncation radius], $z_d = 0.4$ kpc [scale height], $z_t = 1$ kpc [truncation height]) が生成される。

- (b) Cold collapse 問題用の初期条件。この初期条件はコンパイルオプション時に-DINITIAL_CONDITION=1 が指定された場合に選択される。初期条件作成は ic.F90 のサブルーチン cold-collapse_test_IC で行われる。
- (c) Evrard test ([Evrard \[1988,MNRAS,235,911\]](#) の第 3.3 節) 用の初期条件。この初期条件はコンパイルオプション時に-DINITIAL_CONDITION=2 が指定された場合に選択される。初期条件作成は ic.F90 のサブルーチン Evrard-test_IC で行われる。作成方法は 2 つあり、サブルーチンの最後の引数の値を手動で 0 か 1 にして指定する。0 の場合、格子状に並んだ SPH 粒子から Evrard 球の密度分布を作成する。1 の場合、ガラス状に分布した SPH 粒子から Evrard 球の密度分布を作成する。1 を選択するためには、事前に次項で説明するモードで SPH 粒子のデータを作成しておく必要がある。
- (d) $[-1, 1]^3$ の立方体中に一様密度のガラス状の SPH 粒子分布を作成するための初期条件/動作モード。この初期条件はコンパイルオプション時に-DINITIAL_CONDITION=3 が指定された場合に選択される。初期条件作成は ic.F90 のサブルーチン make_glass_IC で行われる。

コード全体の構造は以下のようになっている:

- (1) FDPS で使用するオブジェクトの生成と初期化
- (2) (必要であれば) Phantom-GRAPE ライブラリの初期化
- (3) 初期条件ファイルの読み込み、或いは、初期条件の作成
- (4) 終了時刻まで粒子の運動を計算

以下で、個々について詳しく説明を行う。

7.1.5.1 fdps_controller 型オブジェクトの生成

ユーザは FDPS の API を使用するために、FDPS_controller 型オブジェクトを生成しなければならない。本サンプルコードでは、FDPS_controller 型オブジェクト fdps_ctrl をメインルーチンで生成している:

Listing 62: fdps_controller 型オブジェクトの生成

```

1 subroutine f_main()
2   use fdps_module
3   implicit none
4   !* Local variables
5   type(fdps_controller) :: fdps_ctrl
6
7   ! Do something
8
9 end subroutine f_main

```

ここに示したコードは実際にサンプルコードから必要な部分だけを取り出したものであることに注意して頂きたい。上記の理由から、以下の説明において、FDPS の API はこのオブジェクトのメンバ関数として呼び出されていることに注意されたい。

7.1.5.2 開始、終了

まずは、FDPS の初期化/開始を行う必要がある。次のように、メインルーチンに記述する。

Listing 63: FDPS の開始

```
1 call fdps_ctrl%ps_initialize();
```

FDPS は、開始したら明示的に終了させる必要がある。今回は、プログラムの終了と同時に FDPS も終了させるため、メインルーチンの最後に次のように記述する。

Listing 64: FDPS の終了

```
1 call fdps_ctrl%ps_finalize();
```

7.1.5.3 オブジェクトの生成と初期化

FDPS の初期化に成功した場合、ユーザーはコード中で用いるオブジェクトを作成する必要がある。本節では、オブジェクトの生成/初期化の仕方について、解説する。

7.1.5.3.1 粒子群オブジェクトの生成と初期化

本サンプルコードでは、 N 体粒子と SPH 粒子のデータを異なる粒子群オブジェクトを用いて管理する。2つの整数 psys_num_nbody と psys_num_sph は、それぞれ、 N 体粒子と SPH 粒子の粒子群オブジェクトの識別番号を格納する変数である。これら 2 つの整数を使い、粒子群オブジェクトを生成・初期化を以下のように行っている。

Listing 65: 粒子群オブジェクトの生成・初期化

```
1 call fdps_ctrl%create_psyst(psys_num_nbody, 'fp_nbody')
2 call fdps_ctrl%init_psyst(psys_num_nbody)
3 call fdps_ctrl%create_psyst(psys_num_sph, 'fp_sph')
4 call fdps_ctrl%init_psyst(psys_num_sph)
```

7.1.5.3.2 領域情報オブジェクトの生成と初期化

本サンプルコードでは、計算領域の分割を、 N 体粒子と SPH 粒子を合わせた粒子全体が等分割されるように行うこととする。この場合、必要な領域情報オブジェクトは 1 つである。したがって、本コードでは領域情報オブジェクトの識別番号を格納する整数変数 dinfo_num を用意し、それを用いて生成・初期化を次のように行っている。

Listing 66: 領域情報オブジェクトの生成・初期化

```
1 call fdps_ctrl%create_dinfo(dinfo_num)
2 call fdps_ctrl%init_dinfo(dinfo_num, coef_ema)
```

7.1.5.3.3 ツリーオブジェクトの生成と初期化

本サンプルコードでは、重力計算用、密度計算、圧力勾配加速度計算のそれぞれに1つずつツリーを用意している。ツリーオブジェクトの初期化の際には、API `init_tree` の第2引数に計算で使用する大雑把な粒子数を渡す必要がある。重力計算用のツリーオブジェクト(変数 `tree_num_grav` を介して制御される)では、ローカル粒子数の3倍の値を渡している。一方、密度計算と圧力勾配加速度計算に使用されるツリーオブジェクト(それぞれ変数 `tree_num_dens` と `tree_num_hydro` を介して制御される)では、ローカルのSPH粒子数の3倍の値を渡している。

Listing 67: ツリーオブジェクトの生成・初期化

```

1  nptcl_loc_sph    = max(fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num_sph),1)
2  nptcl_loc_nbody = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num_nbody)
3  nptcl_loc_all   = nptcl_loc_nbody + nptcl_loc_sph
4  !*** tree for gravity calculation
5  call fdps_ctrl%create_tree(tree_num_grav, &
6      "Long,force_grav,ep_grav,ep_grav,Monopole")
7  call fdps_ctrl%init_tree(tree_num_grav, 3*nptcl_loc_all, theta, &
8      n_leaf_limit, n_group_limit)
9  !*** tree for the density calculation
10 call fdps_ctrl%create_tree(tree_num_dens, &
11     "Short,force_dens,ep_hydro,ep_hydro,Gather")
12 call fdps_ctrl%init_tree(tree_num_dens, 3*nptcl_loc_sph, theta, &
13     n_leaf_limit, n_group_limit)
14
15  !*** tree for the hydrodynamic force calculation
16  call fdps_ctrl%create_tree(tree_num_hydro, &
17      "Short,force_hydro,ep_hydro,ep_hydro,
18      Symmetry")
18  call fdps_ctrl%init_tree(tree_num_hydro, 3*nptcl_loc_sph, theta, &
19      n_leaf_limit, n_group_limit)

```

7.1.5.4 初期条件の設定

初期条件の設定はサブルーチン `setup_IC` で行われる。このサブルーチンはマクロ INITIAL_CONDITION の値に応じて、内部でさらに別のサブルーチンを呼び出しており、呼び出されるサブルーチンとマクロの値の対応は、既に述べた通りである。引数の `time_dump`, `dt_dump`, `time_end` は、データ出力の最初の時刻、出力時間間隔、シミュレーション終了時間を表す変数であり、個々の初期条件作成関数の中で設定すべきものである。また、境界条件、重力ソフトニングの値(`eps_grav`)、系に許される最大の時間刻み(`dt_max`)も設定する必要がある(`dt_max`に関しては必ずしも設定する必要はない)。

Listing 68: 初期条件の設定

```

1  call setup_IC(psys_num_nbody, psys_num_sph, dinfo_num, &
2      time_dump, dt_dump, time_end)

```

以下、円盤銀河の初期条件を設定するサブルーチン `galaxy_IC` について、留意事項を述べておく。

- MAGI が作成する粒子データは MAGI のコード内単位系で出力される。単位系の情報は MAGI を実行したときに出力されるファイル doc/unit.txt に記述されている。このファイルに記載された単位質量、単位長さ、単位時間の値と、定数 magi_unit_mass, magi_unit_leng, magi_unit_time は一致させなければならない。
- 関数が読み込むファイルは ./magi_data/dat/Galaxy.tipsy である。別なファイルを読み込ませたい場合、手動でソースコードを変更する必要がある。
- 関数が生成するガス分布は $R (\equiv \sqrt{x^2 + y^2})$ 方向と z 方向に exponential な密度分布を持つガス円盤である。それぞれの方向のスケール長が変数 Rs, zd で、分布を打ち切る距離は変数 Rt, zt である。
- 初期のガスの熱力学的状態はガス温度 temp と水素原子に対する平均分子量 mu を与えて指定する。コンパイル時マクロ USE_ENTROPY が定義済み/未定義に関わらず、粒子の熱力学的状態は単位質量あたりの内部エネルギーとして与える必要がある (fp_sph のメンバ変数 eng)。USE_ENTROPY が定義済みの場合、メインルーチン f_main() で呼び出されている サブルーチン set_entropy によって、計算された密度と内部エネルギーの初期値から初期エントロピーが自動的に決定される。未定義の場合、ここで設定した eng の値がそのまま内部エネルギーの初期値となる。

7.1.5.5 領域分割の実行

複数の粒子種がある場合に、これらを合わせた粒子分布に基づいて領域分割を実行するには、領域情報オブジェクト用の 2 つの API collect_sample_particle と decompose_domain を併用する必要がある。まず、API collect_sample_particle でそれぞれの粒子群オブジェクトからサンプル粒子を集める。このとき、2 種類目以降の粒子種に対する呼び出しでは、第 3 引数に .false. を指定する必要がある。この指定がないと、1 種類目の粒子群オブジェクトの情報がクリアされてしまうからである。すべての粒子群オブジェクトに対して、この API の呼び出しが終わったら、API decompose_domain で領域分割を実行する。

Listing 69: 領域分割の実行

```

1 call fdps_ctrl%collect_sample_particle(dinfo_num, psys_num_nbody, clear)
2 call fdps_ctrl%collect_sample_particle(dinfo_num, psys_num_sph, unclear)
3 call fdps_ctrl%decompose_domain(dinfo_num)

```

7.1.5.6 粒子交換の実行

先程計算した領域情報に基いてプロセス間の粒子の情報を交換するには、粒子群オブジェクト用 API exchange_particle を使用する:

Listing 70: 粒子交換の実行

```

1 call fdps_ctrl%exchange_particle(psys_num_nbody, dinfo_num)

```

```
2 call fdps_ctrl%exchange_particle(psys_num_sph, dinfo_num)
```

7.1.5.7 相互作用計算の実行

領域分割・粒子交換が完了したら、計算開始時の加速度を決定するため、相互作用計算を行う必要がある。以下に、本サンプルコードにおける初期条件作成後最初の相互作用計算の実装を示す。最初に重力計算をし、その後、密度計算・圧力勾配加速度計算を行っている。

Listing 71: 相互作用計算の実行

```

1  !*** Gravity calculation
2  t_start = fdps_ctrl%get_wtime()
3 #if defined(ENABLE_GRAVITY_INTERACT)
4  call fdps_ctrl%set_particle_local_tree(tree_num_grav, psys_num_nbody)
5  call fdps_ctrl%set_particle_local_tree(tree_num_grav, psys_num_sph,
6      unclear)
7  pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_gravity_ep_ep)
8  pfunc_ep_sp = c_funloc(calc_gravity_ep_sp)
9  call fdps_ctrl%calc_force_making_tree(tree_num_grav, &
10      pfunc_ep_ep, &
11      pfunc_ep_sp, &
12      dinfo_num)
13 nptcl_loc_nbody = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num_nbody)
14 call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num_nbody, ptcl_nbody)
15 do i=1,nptcl_loc_nbody
16     call fdps_ctrl%get_force(tree_num_grav, i, f_grav)
17     ptcl_nbody(i)%acc%x = f_grav%acc%x
18     ptcl_nbody(i)%acc%y = f_grav%acc%y
19     ptcl_nbody(i)%acc%z = f_grav%acc%z
20     ptcl_nbody(i)%pot    = f_grav%pot
21 end do
22 offset = nptcl_loc_nbody
23 nptcl_loc_sph = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num_sph)
24 call fdps_ctrl%get_psys_fptr(psys_num_sph, ptcl_sph)
25 do i=1,nptcl_loc_sph
26     call fdps_ctrl%get_force(tree_num_grav, i + offset, f_grav)
27     ptcl_sph(i)%acc_grav%x = f_grav%acc%x
28     ptcl_sph(i)%acc_grav%y = f_grav%acc%y
29     ptcl_sph(i)%acc_grav%z = f_grav%acc%z
30     ptcl_sph(i)%pot_grav  = f_grav%pot
31 end do
32 #endif
33 t_grav = fdps_ctrl%get_wtime() - t_start
34 !*** SPH calculations
35 t_start = fdps_ctrl%get_wtime()
36 #if defined(ENABLE_HYDRO_INTERACT)
37 call calc_density_wrapper(psys_num_sph, dinfo_num, tree_num_dens)
38 call set_entropy(psys_num_sph)
39 call set_pressure(psys_num_sph)
40 pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_hydro_force)
41 call fdps_ctrl%calc_force_all_and_write_back(tree_num_hydro, &
42                                              pfunc_ep_ep, &
43                                              psys_num_sph, &
```

```

43                                         dinfo_num)
44 #endif
45 t_hydro = fdps_ctrl%get_wtime() - t_start

```

まず重力計算の方法について説明する。重力計算は、 N 体粒子と SPH 粒子の両方が関わる。このような複数の粒子種の間で 1 つの相互作用計算を行うには、ツリーオブジェクト用の API `set_particle_local_tree` と `calc_force_making_tree` を合わせて使用する必要がある。まず、各粒子群オブジェクトに対して、API `set_particle_local_tree` を使って、粒子情報をツリーオブジェクトに渡す。このとき、2 種類目以降の粒子群オブジェクトに対する呼び出しへは、第 3 引数に `.false.` を指定する必要がある。この指定が無いと、これまでツリーオブジェクトに渡した粒子情報がクリアされてしまうからである。重力計算に関するすべての粒子群オブジェクトに対して、この API の呼び出しが完了したら、API `calc_force_making_tree` で相互作用計算を行う。相互作用計算の結果を取得するためには、API `get_force` を使う。この API は引数に整数 i を取り、API `set_particle_local_tree` で i 番目に読み込んだ粒子が受ける相互作用を返す。したがって、2 種類目以降の粒子種の相互作用の結果を取得する場合、適切にオフセット値を指定する必要があることに注意されたい。

次に密度計算と圧力勾配加速度計算について説明する。これらの計算は 1 粒子種しか関わらないため、本チュートリアルでこれまで使ってきた API `calc_force_all_and_write_back` が使用できる。圧力勾配加速度に関しては、サブルーチン `f_main` 内でこの API を直接呼び出している。一方、密度計算は、第 7.1.4 節でも述べた通り、 ρ_i と h_i のイテレーション計算が収束しなかったときのための対処が必要であり、これをサブルーチン `calc_density_wrapper` の中で行っている。実装は次のようになっている。実装はマクロ `ENABLE_VARIABLE_SMOOTHING_LENGTH` が定義済みか未定義かで分岐しており、未定義の場合には固定長カーネルの SPH コードとなるので、単に、API `calc_force_all_and_write_back` を 1 回だけ実行している。一方、上記マクロが定義済みの場合、すべての粒子の ρ_i と h_i が無矛盾に決定されるまで、API `calc_force_all_and_write_back` を繰り返し実行する。各粒子が収束したかの情報は派生データ型 `fp_sph` のメンバ変数 `flag` に格納されており、値が 1 のときに収束していることを示す。`flag` が 1 を取る粒子数が全 SPH 粒子数に一致したときに計算を終わらせている。

Listing 72: サブルーチン `calc_density_wrapper` の実装

```

1 subroutine calc_density_wrapper(psys_num, dinfo_num, tree_num)
2   use fdps_vector
3   use fdps_module
4   use user_defined_types
5   implicit none
6   integer, intent(in) :: psys_num, dinfo_num, tree_num
7   !* Local variables
8   integer :: i, nptcl_loc, nptcl_glb
9   integer :: n_compl_loc, n_compl
10  type(fdps_controller) :: fdps_ctrl
11  type(fp_sph), dimension(:), pointer :: ptcl
12  type(c_funptr) :: pfunc_ep_ep
13
14 #if defined(ENABLE_VARIABLE_SMOOTHING_LENGTH)

```

```

15 nptcl_loc = fdps_ctrl%get_nptcl_loc(psys_num)
16 nptcl_glb = fdps_ctrl%get_nptcl_glb(psys_num)
17 call fdps_ctrl%get_psyst_fptr(psys_num, ptcl)
18 pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_density)
19 ! Determine the density and the smoothing length
20 ! so that Eq.(6) in Springel (2005) holds within a specified accuracy.
21 do
22     ! Increase smoothing length
23     do i=1,nptcl_loc
24         ptcl(i)%smth = scf_smth * ptcl(i)%smth
25     end do
26     ! Compute density, etc.
27     call fdps_ctrl%calc_force_all_and_write_back(tree_num,      &
28                                         & pfunc_ep_ep,      &
29                                         & psys_num,        &
30                                         & dinfo_num)
31     ! Check convergence
32     n_compl_loc = 0; n_compl = 0
33     do i=1,nptcl_loc
34         if (ptcl(i)%flag == 1) n_compl_loc = n_compl_loc + 1
35     end do
36     call fdps_ctrl%get_sum(n_compl_loc, n_compl)
37     if (n_compl == nptcl_glb) exit
38 end do
39 !* Release the pointer
40 nullify(ptcl)
41 #else
42 pfunc_ep_ep = c_funloc(calc_density)
43 call fdps_ctrl%calc_force_all_and_write_back(tree_num,      &
44                                         & pfunc_ep_ep,      &
45                                         & psys_num,        &
46                                         & dinfo_num)
47 #endif
48
49 end subroutine calc_density_wrapper

```

サブルーチン `set_entropy` は、初期条件作成後1回だけ呼び出されるサブルーチンで、エントロピーの初期値をセットする。式(8)から、エントロピーを計算するには初期密度が必要である。そのため、サブルーチン `calc_density_wrapper` の後に配置されている。サブルーチン `set_entropy` では、計算された密度と u_i の初期値を使って、エントロピーをセットする。これ以降は、エントロピーが独立変数となる。

7.1.5.8 時間積分ループ

本サンプルコードでは、時間積分を Leapfrog 時間積分法によって行っている（この方法に関しては、第 4.1.3.5.4 節を参照されたい）。粒子位置を時間推進する $D(\cdot)$ オペレータはサブルーチン `full_drift`、粒子速度を時間推進する $K(\cdot)$ オペレータはサブルーチン `initial_kick`, `final_kick` として実装されている。

8 ユーザーサポート

FDPS を使用したコード開発に関する相談は fdps-support<at>mail.jmlab.jp で受け付けています (<at>は@に変更お願い致します)。以下のような場合は各項目毎の対応をお願いします。

8.1 コンパイルできない場合

ユーザーには以下の情報提供をお願いします。

- コンパイル環境
- コンパイル時に出力されるエラーメッセージ
- ソースコード (可能ならば)

8.2 コードがうまく動かない場合

ユーザーには以下の情報提供をお願いします。

- 実行環境
- 実行時に出力されるエラーメッセージ
- ソースコード (可能ならば)

8.3 その他

思い通りの性能がでない場合やその他の相談なども、上のメールアドレスにお知らせください。

9 ライセンス

MIT ライセンスに準ずる。標準機能のみ使用する場合は、Iwasawa et al. (PASJ, 68, 54)、Namekata et al. (PASJ, 70, 70) の引用をお願いします。

拡張機能の Particle Mesh クラスは GreeM コード (開発者: 石山智明、似鳥啓吾) (Ishiyama, Fukushige & Makino 2009, Publications of the Astronomical Society of Japan, 61, 1319; Ishiyama, Nitadori & Makino, 2012 SC'12 Proceedings of the International Conference on High Performance Computing, Networking Storage and Analysis, No. 5) のモジュールを使用している。GreeM コードは Yoshikawa & Fukushige (2005, Publications of the Astronomical Society of Japan, 57, 849) で書かれたコードをベースとしている。Particle Mesh クラスを使用している場合は、上記 3 つの文献の引用をお願いします。

拡張機能のうち x86 版 Phantom-GRAPE を使用する場合は Tanikawa et al.(2012, New Astronomy, 17, 82) と Tanikawa et al.(2012, New Astronomy, 19, 74) の引用をお願いします。

Copyright (c) <2015> <FDPS development team>

Permission is hereby granted, free of charge, to any person obtaining a copy of this software and associated documentation files (the “Software”), to deal in the Software without restriction, including without limitation the rights to use, copy, modify, merge, publish, distribute, sublicense, and/or sell copies of the Software, and to permit persons to whom the Software is furnished to do so, subject to the following conditions:

The above copyright notice and this permission notice shall be included in all copies or substantial portions of the Software.

THE SOFTWARE IS PROVIDED “AS IS”, WITHOUT WARRANTY OF ANY KIND, EXPRESS OR IMPLIED, INCLUDING BUT NOT LIMITED TO THE WARRANTIES OF MERCHANTABILITY, FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE AND NONINFRINGEMENT. IN NO EVENT SHALL THE AUTHORS OR COPYRIGHT HOLDERS BE LIABLE FOR ANY CLAIM, DAMAGES OR OTHER LIABILITY, WHETHER IN AN ACTION OF CONTRACT, TORT OR OTHERWISE, ARISING FROM, OUT OF OR IN CONNECTION WITH THE SOFTWARE OR THE USE OR OTHER DEALINGS IN THE SOFTWARE.